

# Transport von Bose-Einstein Kondensaten in mesoskopischen Strukturen



Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II-Physik  
der Universität Regensburg

vorgelegt von  
**Tobias Paul**  
aus Passau  
Januar 2006

Die Arbeit wurde von Professor Dr. Klaus Richter angeleitet.

Das Promotionsgesuch wurde am 17. Januar 2006 eingereicht

Das Promotionskolloquium fand am 17. Februar statt.

Prüfungsausschuß

Vorsitzender: Prof. Dr. Sergey Ganichev

1. Gutachter: Prof. Dr. Klaus Richter

2. Gutachter: Prof. Dr. Matthias Brack

Weiterer Prüfer: Prof. Dr. Tilo Wettig

*Meinen Lehrern Hans Braunschmidt  
und Richard Merklein*



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Mesoskopische Fallenstrukturen</b>	<b>15</b>
2.1	Fallenmechanismen . . . . .	15
2.1.1	Magnetische Fallen . . . . .	15
2.1.2	Optische Fallen . . . . .	16
2.2	Mesoskopische Fallen . . . . .	18
2.2.1	Magnetische Wellenleiter auf dem <i>Atom-Chip</i> . . . . .	18
2.2.2	Barrierenpotentiale und Punktkontakte . . . . .	21
2.3	Magnetische Unordnungspotentiale . . . . .	24
2.3.1	Ein Modell für Unordnung . . . . .	26
2.3.2	Eigenschaften des Unordnungspotentials . . . . .	30
<b>3</b>	<b><i>Mean-Field</i> Theorie für Kondensate</b>	<b>33</b>
3.1	Die Gross-Pitaevskii-Gleichung . . . . .	33
3.2	<i>Mean-Field</i> Theorie im Materiewellenleiter . . . . .	37
3.2.1	Effektiv eindimensionale Gleichung . . . . .	38
3.2.2	Radialsymmetrische harmonische Wellenleiter . . . . .	40
3.3	Stationäre Lösungen . . . . .	43
3.3.1	Bewegungsgleichung für die Amplitude . . . . .	43
3.3.2	Integration der Bewegungsgleichung . . . . .	44
3.3.3	Stationäre Lösungen im uniformen Wellenleiter . . . . .	47

---

<b>4</b>	<b>Transportphysik mit Bose-Einstein-Kondensaten</b>	<b>54</b>
4.1	Grundlegendes zu Transportprozessen . . . . .	54
4.2	Stationäre Transportmoden . . . . .	56
4.2.1	Homogener Transport durch Wellenleiter . . . . .	57
4.2.2	Stationäre Streuzustände . . . . .	58
4.2.3	Näherungsverfahren zu Berechnung von Transmissionen . .	62
4.2.4	Adiabatische Transmission . . . . .	65
4.2.5	Nichtlineare Strom- und Transmissionscharakteristiken . .	70
4.3	Zeitabhängige Transportprozesse . . . . .	72
4.3.1	Implementierung eines Quellterms . . . . .	73
4.3.2	Zeitabhängige Emission von Materiewellen . . . . .	75
4.3.3	Streuprozesse an einem Barrierenpotential . . . . .	83
4.3.4	Berechnung von Transmissionen . . . . .	88
4.3.5	Transport in dreidimensionalen Wellenleitergeometrien . .	91
<b>5</b>	<b>Transport durch spezielle Potentialstrukturen</b>	<b>96</b>
5.1	Transport durch Quantenpunktkontakte . . . . .	96
5.1.1	Transmission durch eine Gaußförmige Barriere . . . . .	97
5.1.2	Transport durch ein nicht-separables Quantenpunktkontakt- potential . . . . .	101
5.2	Transport durch Doppelbarrierenpotentiale . . . . .	106
5.2.1	Resonante Transportmoden . . . . .	107
5.2.2	Transmission durch ein Doppelbarrierenpotential . . . . .	111
5.2.3	Eine mögliche experimentelle Realisierung . . . . .	115
5.2.4	Temporäre Besetzung eines bistabilen resonanten Zustandes	119
5.3	Transport durch Unordnungspotentiale . . . . .	122
5.3.1	Schwache Unordnungspotentiale . . . . .	124
5.3.2	Moderate und starke Unordnungspotentiale . . . . .	130
5.3.3	Lokalisierung im wechselwirkenden System? . . . . .	136

---

<b>6</b>	<b>Numerische Methoden</b>	<b>139</b>
6.1	Implizites Integrationsschema . . . . .	139
6.2	Entwicklung nach einer Gitterbasis . . . . .	141
6.3	<i>Predictor-Corrector</i> Methode . . . . .	143
6.4	Numerische Genauigkeit . . . . .	144
6.5	Imaginärzeitpropagation . . . . .	146
6.6	Zylindersymmetrische Probleme . . . . .	150
6.7	Höherdimensionale Systeme . . . . .	152
6.8	Numerische Berechnung von Strömen . . . . .	156
6.9	Absorbierende Ränder . . . . .	157
6.10	Numerische Implementierung des Quellterms . . . . .	163
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>166</b>
<b>8</b>	<b>Anhang</b>	<b>172</b>
8.1	Quellterm in zylindersymmetrischen Wellenleitern . . . . .	172
8.2	Näherungsweise Bestimmung von evaneszenten Moden . . . . .	173
8.3	Resonanzen für $\delta$ -förmige Doppelbarrierenpotentiale . . . . .	174
8.4	Zusammenhang zwischen Korrelation und Transmission . . . . .	176
8.5	WKB Methode im semiklassischen Regime . . . . .	177





# Kapitel 1

## Einleitung

Ein Bose-Einstein Kondensat ist einer der wohl außergewöhnlichsten Aggregatzustände der Materie: Teilchen mit ganzzahligem Spin, so genannte Bosonen, kondensieren unterhalb einer kritischen Temperatur alle im gleichen quantenmechanischen Grundzustand. Dieser ungewöhnliche Materiezustand wurde bereits im Jahr 1924 von den Physikern Satyendra Nath Bose und Albert Einstein in zwei bahnbrechenden theoretischen Arbeiten [1,2] vorhergesagt. Anschaulich kann man den Phasenübergang von einem thermischen Bose-Gas zu einem Kondensat verstehen, indem man gemäß der Wellennatur der Materie jedem Boson der Masse  $m$  ein Wellenpaket zuordnet, dessen Ausdehnung mit der thermischen de Broglie Wellenlänge  $\lambda_T = (2\pi\hbar^2/2k_B T)^{1/2}$  skaliert [3]. Ist die Temperatur groß, so verhalten sich die Bosonen wie klassische Teilchen. Für sehr kleine Temperaturen, beginnen die Wellenpakete der Bosonen - sobald eine kritische Phasenraumdichte erreicht ist - zu überlappen, ein Vorgang der für Fermionen aufgrund des Pauli-Prinzips unmöglich ist. Die Bosonen kondensieren im energetischen Grundzustand und bilden ein makroskopisches Quantenobjekt, in welchem die einzelnen Bosonen vollständig delokalisiert sind und durch eine makroskopische Wellenfunktion beschrieben werden können [4,5].

Es bedurfte über 70 Jahre angestrengten Forschens, um diesen exotischen Materiezustand im Experiment in schwachwechselwirkenden bosonischen Atomgasen zu realisieren. Vor allem im letzten Viertel des 20. Jahrhunderts wurden neue experimentelle Techniken zum Kühlen, Einfangen und Speichern von Alkaliatomen entwickelt. Erst Verfahren wie Laserkühlung [5–8], evaporatives Kühlen [9,10], sowie die Kombination von magnetischen und optischen Fallenmechanismen [6,10–12] erlauben es, zu den erforderlichen Kondensationstemperaturen im Nanokelvinbereich vorzustoßen und ein Bose-Einstein-Kondensat mit einer makroskopischen Anzahl an kondensierten Alkaliatomen zu erzeugen. Der Durchbruch gelang im Jahr 1995, als erstmalig Bose-Einstein-Kondensation in ultrakaltem Rubidium ( $^{87}\text{Rb}$ ) [13], Natrium ( $^{23}\text{Na}$ ) [14] und Lithium ( $^7\text{Li}$ ) [15,16]

beobachtet wurde. Inzwischen wurde unter anderem auch in  $^{41}\text{K}$ ,  $^{52}\text{Cr}$ ,  $^{85}\text{Rb}$ ,  $^{133}\text{Cs}$  und  $^{174}\text{Yb}$  Bose-Einstein-Kondensation realisiert.

Die außergewöhnlich gute experimentelle Kontrolle, die man in den letzten Jahren über Bose-Einstein Kondensate bekommen hat, machen diese extrem kohärenten Quantenobjekte zu einzigartigen Systemen, um Fragestellungen aus verschiedensten Teilbereichen der Physik an diesen Vielteilchensystemen zu untersuchen. So lassen sich zum Beispiel elementare quantenmechanische Interferenzeffekte mittels Überlagerung zweier Kondensate direkt beobachten [17, 18] oder die Oszillationen eines Kondensats in einer magnetischen Falle hochpräzise vermessen und mit den Vorhersagen der Quantenmechanik vergleichen [19, 20]. Zudem eignen sich Bose-Einstein-Kondensate als Modellsysteme, um komplexe Phänomene, die aus dem Gebiet der Physik kondensierter Materie bekannt sind, zu studieren. So wurden in einer Reihe faszinierender Experimente Untersuchungen zum Mott-Phasenübergang [21], zur Erzeugung von Vortexstrukturen [22], zum Josephson-Effekt [23], oder zum Übergang eines Bose-Einstein-Kondensates in einen supraleitenden Zustand [24] angestellt. Bose-Einstein-Kondensate erweisen sich auch als ideale Testsysteme, um nichtlineare Effekte, wie Vier-Wellen Mischung [25], die Propagation von hellen [26] und dunklen [27] Solitonen, oder die Dynamik von nichtlinearen Bloch Oszillationen [28, 29] zu betrachten. Neu hinzugekommen sind nun auch Experimente, die die Expansion von Kondensaten in meist optischen Unordnungspotentialen [30–32] im Hinblick auf Lokalisierungsphänomene [33] untersuchen.

Mit der Entwicklung vom Mikrofallen [34, 35], basierend auf der so genannten Atom-Chip-Technologie [36–38], hat die Forschung an Kondensaten eine neue Qualität erreicht. Das Aufbringen von stromdurchflossenen mikroskopischen Leitern auf eine Chipoberfläche erlaubt es, magnetische Fallen für kalte Atome und Kondensate zu erzeugen, deren Größe auf der Mikrometerskala variiert. Die Möglichkeit, Materiewellenleiter auf mesoskopischer Größenskala in komplexen Geometrien zu erzeugen [39], eröffnet neue Perspektiven, in das Regime der mesoskopischen Physik [40] vorzustoßen. Neben der hochpräzisen Untersuchung von Interferenzeffekten der Kondensate in solchen Wellenleitern [17, 41, 42], lassen sich auch kohärente Transportprozesse von Kondensaten realisieren. So kann man ein Kondensat in einem Wellenleiter erzeugen [37, 38], in diesem propagieren lassen [43, 44] und den Einfluss der interatomaren Wechselwirkung auf die dynamischen Eigenschaften des Kondensates unter genau kontrollierbaren Bedingungen detailliert studieren [45]. Schließlich werden im Kontext von Wellenleitern auch magnetisch induzierte Unordnungspotentiale [46, 47] diskutiert, die zu einer Reihe von interessanten Effekten, wie zum Beispiel der Fragmentierung eines Kondensats im Wellenleiter, führen.

Da die für Kondensate betrachteten Fallenpotentiale große Ähnlichkeiten zu Leiterstrukturen haben, die in der elektronischen Transportphysik untersucht wer-

den, stellt sich in diesem Zusammenhang die Frage, inwieweit Phänomene und Konzepte, die aus der mesoskopischen Transportphysik von Elektronen [48, 49] bekannt sind, auf Transportprozesse von kalten Atomen und Kondensaten übertragen werden können. Von besonderem Interesse ist dabei der Einfluss der Teilchen-Teilchen Wechselwirkung auf Transportprozesse. Hat man es bei elektronischem Transport mit der langreichweitigen Coulombwechselwirkung [50] zu tun, so handelt es sich bei der Wechselwirkung zwischen kalten Atomen um eine kurzreichweitige Kontaktwechselwirkung [51], die wesentlich einfacher zu kontrollieren ist; ihre Stärke kann zudem über Feshbachresonanzen [52, 53] mittels eines magnetischen Feldes variiert werden. Deswegen kann man Kondensate in mesoskopischen Wellenleitern zu recht als hochreine Modellsysteme ansehen, um das Wechselspiel zwischen Transporteigenschaften und Atom-Atom Wechselwirkung unter kontrollierbaren Bedingungen zu untersuchen. Diese Tatsache motiviert es, Konzepte aus der elektronischen Mesoskopik auf den Transport von kalten Atomen oder Kondensaten zu übertragen. So konnte die Landauer-Theorie [49, 54], die für elektronischen Transport entwickelt wurde, für die Propagation nichtwechselwirkender, inkohärenter Atome durch einen Quantenpunktkontakt erweitert werden [55]. Desweiteren wird im Kontext von Kondensattransport durch ein quantenpunktähnliches Potential [56] ein Atomblockadeeffekt [57], ähnlich dem wohlbekannten Coulombblockadeeffekt [58], diskutiert: Aus energetischen Gründen kann sich jeweils nur ein einzelnes Atom in der quantenpunktähnlichen Potentialstruktur befinden. Allerdings sind die Analogien zwischen dem elektronischen Blockadeeffekt und dem Atom Blockade-Effekt begrenzt, da die Coulombwechselwirkung langreichweitig und zudem viel stärker als die interatomare Wechselwirkung ist.

Im Rahmen der bisher entwickelten Ansätze zur Beschreibung von Transporteffekten, ist es teilweise schwierig, Wechselwirkungseffekte zu implementieren, die Kohärenz des Kondensats zu berücksichtigen oder über das Regime einiger weniger am Transportprozess beteiligter Atome hinauszugehen. Deswegen beschreiten wir in dieser Arbeit einen neuen Weg, den Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch mesoskopische Potentialstrukturen zu untersuchen: Wir entwickeln einen Formalismus, der es erlaubt, kohärenten Transport von Bose-Einstein-Kondensaten im Regime vieler am Transportprozess beteiligter Atome zu beschreiben. Wir wählen dazu einen wellenmechanischen Zugang, der auf der nichtlinearen Gross-Pitaevskii-Gleichung [3, 59] basiert. Diese Wellengleichung wurde 1961 unabhängig von E.P. Gross und L. Pitaevskii aus einem feldtheoretischen Vielteilchenformalismus abgeleitet, wobei die grundlegende Annahme darin besteht, dass die kondensierten Atome alle den gleichen quantenmechanischen Grundzustand besetzen und durch eine makroskopische Wellenfunktion beschrieben werden können. Die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung beschreibt somit das Verhalten des Kondensats auf dem Niveau einer Hartree *Mean-Field* Näherung [51]. Sie determiniert das Verhalten der makroskopischen Kondensatwellenfunktion im Regime stark verdünnter [60], schwach wechselwirkender Bo-

segase und ist für Temperaturen weit unterhalb der Kondensationstemperatur gültig. Zur Herleitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung wird eine kurzreichweitige Atom-Atom Wechselwirkung angenommen, die zu einem nichtlinearen Term in der Wellengleichung führt. Besonders gut wird dies von Alkaliatomen erfüllt, daher hat sich die Gross-Pitaevskii-Gleichung als besonders geeignet zur Beschreibung solcher Kondensate erwiesen [61].

Ziel dieser Arbeit ist es, den Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch mesoskopische Potentialstrukturen auf dem Niveau der Gross-Pitaevskii-Gleichung zu untersuchen. Dazu geben wir in Kapitel 2 einen Überblick über gängige Fallenmechanismen, erklären die grundlegenden Konzepte zur Erzeugung von mesoskopischen Wellenleitersystemen und zeigen Wege auf, wie Quantenpunktkontakte und Quantenpunktstrukturen in Wellenleitersystemen implementiert werden können. Des Weiteren entwickeln wir, motiviert durch die Beobachtung von Fragmentierungseffekten, ein neuartiges phänomenologisches Modell für magnetische Unordnungspotentiale in Wellenleitern. Wir werden zeigen, dass dieses Modell die grundlegenden Eigenschaften von experimentell detektierten Unordnungspotentialen wiedergibt, wenn man stark verunreinigte Mikrodrähte mit vielen topologischen Defekten als Modell zugrunde legt.

In Kapitel 3 skizzieren wir zunächst die wichtigsten Schritte zur Herleitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung und leiten dann eine quasi-eindimensionale Version dieser Gleichung ab, die besonders geeignet ist, das Verhalten von Kondensaten in einem Materiewellenleiter zu beschreiben. Einen großen Teil dieses Kapitels wird die Diskussion der stationären Lösungen dieser eindimensionalen Wellengleichung in einem uniformen Wellenleiter einnehmen.

Die Entwicklung neuartiger Methoden zur Beschreibung von Transport durch Wellenleitergeometrien steht in Mittelpunkt von Kapitel 4. Im ersten Teil dieses Kapitels zeigen wir ein Verfahren auf, das eine systematische Untersuchung von stationären Streuzuständen in Wellenleitern mit Streupotentialen ermöglicht. Zudem entwickeln wir eine konzeptionelle Erweiterung der aus der linearen Quantenmechanik wohlbekannten Größen von Reflexions- und Transmissionskoeffizienten; dies wird es erlauben, Transmission und Reflexion auch für die nicht-lineare Gross-Pitaevskii-Gleichung eindeutig zu definieren. Im zweiten Teil des Kapitels beschäftigen wir uns mit zeitabhängigen Transportprozessen und führen eine Methode ein, die die Ankopplung eines Wellenleiters an ein mit Kondensat gefülltes Reservoir simuliert, aus dem eine Materiewelle in den Wellenleiter injiziert wird. Damit wird die realistische Simulation eines kohärenten Flusses von Bose-Einstein-Kondensat durch einen Wellenleiter möglich. Insbesondere werden wir damit in der Lage sein zu untersuchen, unter welchen Umständen stationäre Streuzustände von wechselwirkenden Kondensaten in Wellenleitersystemen besetzt werden und dynamisch stabil sind.

In Kapitel 5 wenden wir die in Kapitel 4 erarbeiteten Konzepte an, um Trans-

portprozesse durch drei exemplarische mesoskopische Potentialstrukturen zu untersuchen. Zunächst wenden wir unsere Verfahren auf ein einfaches Quantenpunktkontaktpotential an, berechnen stationäre Streuzustände und geben Transmissionsspektren für solch ein System an. Insbesondere werden wir in diesem Zusammenhang nichtlineare Transmissionscharakteristiken diskutieren. In einem zweiten Schwerpunkt untersuchen wir Transport durch ein symmetrisches Doppelbarrierenpotential, das als Quantenpunkt angesehen werden kann. In diesem Zusammenhang diskutieren wir die Existenz von resonanten Transportmoden und werden auf Bistabilitäten im Transmissionsspektrum, wie sie auch aus der nichtlinearen Optik bekannt sind, stoßen. Unsere Simulationen zeitabhängiger Transportprozesse werden zeigen, dass die interatomare Wechselwirkung den resonanten Transport im Allgemeinen unterdrückt, dass jedoch eine Besetzung resonanter Zustände durch ein geeignetes adiabatisches Kontrollschema temporär möglich wird [62]. Schließlich untersuchen wir den Transport durch Wellenleiter mit Unordnungspotentialen. Für schwache Unordnungspotentiale und moderate interatomare Wechselwirkungen entwickeln wir einen analytischen Zugang zur Berechnung von Transmissionskoeffizienten und werden ein semiklassisches Regime identifizieren, das eine nahezu perfekte Transmission durch die Unordnungsregion erlaubt. Transport im Regime von starker Unordnung und starken Wechselwirkungen werden wir mittels numerischer Simulationen untersuchen. Dabei wird sich herausstellen, dass in Unordnungspotentialen, die eine kritische Länge überschreiten, keine stationären Streuzustände mehr besetzt werden, sondern der Kondensatfluss eine stark zeitabhängige Dynamik aufweist [63]. Abschließend werden wir diskutieren, in wie weit das wohlbekannte Szenario der Anderson-Lokalisierung [64] für Transportprozesse wechselwirkender kondensierter Atome noch zutreffend ist.

Das Kapitel 6 gibt einen Überblick auf den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten numerischen Apparat. Besonders zur Simulation von zeitabhängigen Transportprozessen in einem an ein Reservoir gekoppelten Wellenleiter kommen neuartige numerische Verfahren zum Einsatz. Wir lösen die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung auf einem diskreten Gitter mit einem impliziten Integrationsschema. Da wir bei Transportprozessen in der Regel ein offenes System betrachten, müssen wir zum einen an den Rändern des diskreten Gitters absorbierende Randbedingungen verwenden, um dort artifizielle Rückreflexionen zu unterbinden. Wir verwenden dazu ein ursprünglich für die lineare Schrödingergleichung konzipiertes Verfahren, das von uns speziell für die im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Problemstellung auf die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung erweitert wurde. Zum anderen zeigen wir, wie sich ein Materiewellen emittierender Quellterm in das in dieser Arbeit verwendete Integrationsschema implementieren lässt.

Den Abschluss der Arbeit bildet eine Zusammenfassung, in der zentrale Ergebnisse der Arbeit, aber auch die konzeptionellen Grenzen des von uns verwendeten Ansatzes dargestellt werden. Wir geben zudem einen kurzen Ausblick auf mögli-

che zukünftige Projekte, die auf dieser Arbeit aufbauen können.

# Kapitel 2

## Mesoskopische Fallenstrukturen

In diesem Kapitel werden wir zunächst die physikalischen Grundlagen für magnetische und optische Fallen kurz zusammenfassen. Wir gehen dann auf spezielle mesoskopische Fallenstrukturen ein, die im Rahmen der *Atom-Chip Technologie* realisiert werden können. Schließlich stellen wir ein von uns entwickeltes Modell zur Beschreibung von magnetischen Unordnungspotentialen in Wellenleiterstrukturen vor.

### 2.1 Fallenmechanismen

Bose-Einstein-Kondensate bestehen in der Regel aus neutralen, bosonischen Atomen. Dies bedeutet, dass Techniken, die zum Einfangen geladener Teilchen verwendet werden, hier nicht zum Einsatz kommen können, um Fallenpotentiale zu generieren. Dennoch besteht die Möglichkeit, neutrale Atome in einem Fallenpotential zu lokalisieren und zu speichern. Für Atome mit magnetischem Moment nutzt man die Zeeman-Wechselwirkung, um eine magnetische Fallenstruktur zu erzeugen. Eine weitere Methode besteht darin, die Kraft, die auf ein neutrales Atom im Laserfeld wirkt, zu nutzen, um eine optische Falle zu erzeugen.

#### 2.1.1 Magnetische Fallen

Die physikalische Grundlage für magnetische Fallen ist der Zeeman-Effekt: Neutrale Atome mit einem magnetischen Moment  $\mu_b$  erfahren in einem Magnetfeld der Stärke  $B$  eine zusätzliche potentielle Energie, die in guter Näherung linear in der Feldstärke  $B$  ist

$$V_{mag} = m_l \mu_b B; \tag{2.1}$$

$m_l$  ist dabei die Drehimpulsquantenzahl der Drehimpulskomponente parallel zum Magnetfeld. Sehr häufig (z.B. bei  $^{87}\text{Rb}$ ) ist  $|m_l| = 1$  (für eine genaue Abhandlung des Zeeman-Effekts vgl. z.B. [7, 65]). Wenn das magnetische Moment positives Vorzeichen hat, wirkt auf das Atom eine Kraft in Richtung der zunehmenden Feldstärke, falls es negativ ist, wirkt die Kraft in Richtung abnehmender Feldstärke. Deshalb werden Zustände mit positivem magnetischen Moment als *high-field seekers* und diejenigen mit negativen als *low-field seekers* bezeichnet. Um nun mittels magnetischer Felder Atome einzufangen, müssen Feldkonfigurationen mit einem lokalen Minimum oder Maximum der Feldstärke erzeugt werden. Die zweite Methode scheidet aus, da es generell unmöglich ist, ein Magnetfeldmaximum in einem stromfreien Bereich des Raumes zu erzeugen [66]. Daher sind nur Feldkonfigurationen mit lokalen Minima von Interesse, und es können nur *low-field seekers* gefangen werden.

Generell werden Fallenkonfigurationen favorisiert, bei denen  $B$  am Feldminimum nicht verschwindet, da sonst durch kleine thermische Fluktuationen das magnetische Moment seine Ausrichtung zum Feld flippen kann, und das Teilchen dadurch instantan ein repulsives Potentialmaximum erfährt und somit aus der Falle ausgestoßen wird. Einen Überblick über verschiedene etablierte Magnetfallen kann in [51] gefunden werden. In Abschnitt (2.2) geben wir eine kurze Einführung über die Realisierung von mesoskopischen Fallenstrukturen, die für diese Arbeit von Relevanz sind.

### 2.1.2 Optische Fallen

Aus der Atomphysik ist bekannt, dass einem Atom, das sich in einem elektrischen Feld befindet, ein Dipolmoment  $\vec{D}$  induziert wird [67]. In der Dipolapproximation wird die Wechselwirkung zwischen dem Dipolmoment und dem elektrischen Feld  $\vec{E}$  durch den Hamiltonoperator

$$H = -\hat{\vec{D}} \cdot \vec{E} \quad (2.2)$$

beschrieben. Des Weiteren lautet der Zusammenhang zwischen dem Erwartungswert des Dipolmoments und dem elektrischem Feld folgendermaßen

$$\langle \hat{\vec{D}} \rangle = \alpha \vec{E}. \quad (2.3)$$

Die hierbei eingeführte Größe  $\alpha$  ist die *Polarisierbarkeit* des Atoms. Für ein periodisch oszillierendes elektrisches Feld  $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t)$ , wie es bei Laserlichtfeldern von Relevanz ist, lässt sich zeigen, dass das nun frequenzabhängige  $\alpha(\omega)$  von der Form

$$\alpha(\omega) = \sum_e \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \hat{\vec{D}} \cdot \vec{E} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2} \quad (2.4)$$



ist; hierbei bezeichnet  $|g\rangle$  den Grundzustand und  $|e\rangle$  die angeregten Zustände des Atoms. Im periodisch oszillierenden Feld erfährt das Atom eine Energieverschiebung [6]

$$\Delta V_{opt}(\vec{r}) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle E^2(\vec{r}, t) \rangle_t. \quad (2.5)$$

Da der zeitliche Mittelwert  $\langle E^2 \rangle_t$  ortsabhängig sein kann, wird durch das elektrische Feld ein ortsabhängiges Potential für die Atome induziert.

Befindet man sich mit der Frequenz  $\omega$  nahe an einem optischen Übergang vom Grundzustand zu einem angeregtem Zustand, so wird der entsprechende Term in der Summe (2.4) dominant, und wir können dann schreiben

$$\alpha(\omega) \approx \frac{|\langle e | \hat{\vec{D}} \cdot \vec{E} | g \rangle|^2}{E_e - E_g - \hbar\omega}. \quad (2.6)$$

Berücksichtigt man noch, dass der angeregte Zustand nur eine endliche Lebensdauer  $1/\Gamma_e$  hat, so wird der Zusammenhang (2.6) modifiziert und es gilt

$$\alpha(\omega) \approx \frac{|\langle e | \hat{\vec{D}} \cdot \vec{E} | g \rangle|^2}{E_e - E_g - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_e}. \quad (2.7)$$

Durch die Dipolwechselwirkung wird also das externe ortsabhängige Potential  $\Delta V_{opt}(\vec{r})$  induziert.

Wir untersuchen nun noch, unter welchen Umständen, das Potential attraktive bzw. repulsive Wirkung hat. Dazu betrachten wir die Kraft, die aufgrund der Dipolwechselwirkung auf das Atom wirkt; letztere ist gegeben durch

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V_{opt}(\vec{r}) = \frac{1}{2}Re(\alpha(\omega))\nabla\langle E^2(\vec{r}, t) \rangle_t. \quad (2.8)$$

Fernab von der Resonanzfrequenz  $\omega_r = (E_e - E_g)/\hbar$  ist  $\alpha(\omega)$  sehr klein, und das optisch induzierte Potential ebenfalls. Nahe bei  $\omega_r$  wird der Betrag von  $\alpha(\omega)$  sehr groß, es ist aber zu beachten, dass die Polarisierbarkeit an der Resonanzfrequenz ihr Vorzeichen wechselt. Mit (2.8) findet man, dass für  $\omega < \omega_r$  (Rotverschiebung) das Atom in Raumbereiche höherer Feldstärken getrieben wird, während für  $\omega > \omega_r$  (Blauverschiebung) das genau umgekehrte Verhalten eintritt. Erzeugt man also zum Beispiel mit Laserlicht eine räumlich inhomogene Intensitätsverteilung, so lässt sich je nach Wahl der Lichtfrequenz  $\omega$  ein attraktiv oder repulsiv wirkendes optisches Potential erzeugen. Insbesondere kann der rotverschobene Fall dazu genutzt werden, um an einem lokalen Intensitätsmaximum kalte Atome zu fangen [6].

## 2.2 Mesoskopische Fallen

Nachdem wir nun zwei Mechanismen zur Erzeugung von Fallenpotentialen kennengelernt haben, wenden wir uns nun der Realisierung *mesoskopischer* Fallenpotentiale zu. Wir stellen im Folgenden einige Konzepte vor, welche nötig sind, um die Potentialstrukturen zu erzeugen, durch welche wir später Transport von Bose-Einstein-Kondensaten untersuchen wollen.

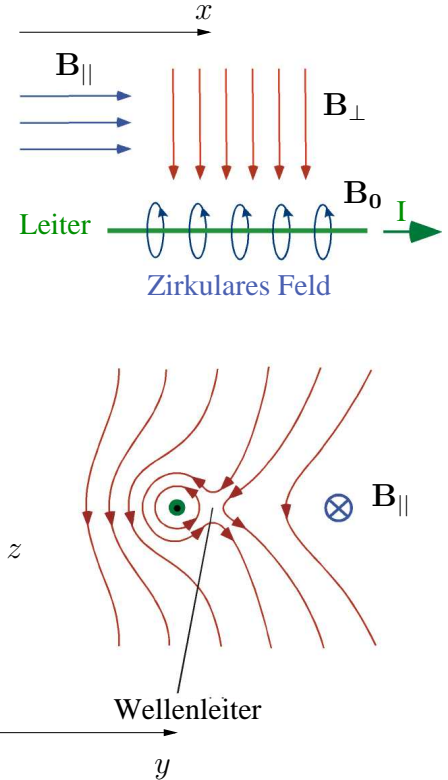
### 2.2.1 Magnetische Wellenleiter auf dem *Atom-Chip*

Wir erklären in diesem Abschnitt das grundlegende Prinzip, einen uniformen Wellenleiter zu erzeugen. Die grundlegende Idee wurde 1933 zuerst von Frisch und Segre beschrieben [68]: Wir betrachten die Superposition eines zirkularen Magnetfeldes  $\vec{B}_0$ , das von einem dünnen, geraden, den Strom  $I$  führenden Draht erzeugt wird, mit einem homogenen Magnetfeld  $\vec{B}_\perp$  (vgl. Abb.2.1)

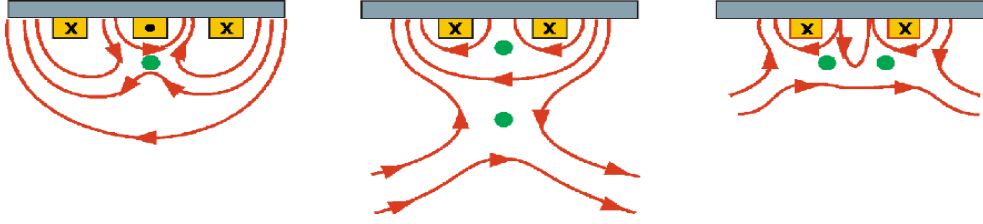
$$\vec{B}_0 + \vec{B}_\perp = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{I}{r} \vec{e}_\phi + B_\perp \vec{e}_z. \quad (2.9)$$

(In Abb.2.1 liegt der Vektor  $\vec{e}_\phi$  in der  $x-y$  Ebene). Die Superposition dieser beiden Felder erzeugt ein wohldefiniertes Feldminimum (mit verschwindender Feldstärke) parallel zum stromführenden Draht an der Stelle, wo das zirkulare Magnetfeld  $\vec{B}_0$  exakt durch das homogene Feld  $\vec{B}_\perp$  kompensiert wird (das Feld nimmt eine Quadrupolkonfiguration an [50]). Der Abstand  $h$  zwischen dem Draht und dem Feldminimum skaliert gemäß dem Amperschen Gesetz als  $h \sim I/B_\perp$ . Wir haben in Abschnitt 2.1.1 bereits erwähnt, dass Feldkonfigurationen mit verschwindendem Feld ungeeignet zum Fangen von kalten Atomen sind, da sonst Spin-Flip-induzierte Verluste aus der Falle groß werden. Um diese Prozesse zu vermeiden, wird ein zusätzliche homogenes Magnetfeld  $\vec{B}_\parallel$ , das parallel zum Draht zeigt, angelegt. Das Gesamtfeld ist dann als Summe der drei Feldbeiträge gegeben

$$\vec{B}_{ges} = \vec{B}_0 + \vec{B}_\perp + \vec{B}_\parallel. \quad (2.10)$$



**Abbildung 2.1:** Schematische Skizze eines Side Wire Guide.



**Abbildung 2.2:** Konfigurationen von stromtragenden Drähten zur Erzeugung von einem oder zwei zur Chipoberfläche parallelen Wellenleitern (gekennzeichnet durch grüne Punkte).

Berechnet man nun den Betrag  $|B_{ges}|$  nahe am Feldminimum, so können wir dort das magnetische Fallenpotential  $V_{magn}(\vec{r}) = \mu_b |B_{ges}|$  harmonisch approximieren und finden

$$V_{mag}(r) = \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 r^2, \text{ mit } \omega_{\perp} = 8\pi^2 B_{\perp}^4 / (\mu_b^2 I^2 B_{\parallel}). \quad (2.11)$$

(Der Radius  $r$  ist durch  $r = \sqrt{y^2 + z^2}$  gegeben, wenn man die  $x$ -Achse entlang des Magnetfeldminimums legt). Das Potential (2.10) ist unabhängig von  $x$  und somit uniform entlang der longitudinalen Achse des Wellenleiters. Die hier beschriebene Konfiguration wird in der Literatur im Allgemeinen als *Side Wire Guide* bezeichnet [39, 69].

Das Kompensationsmagnetfeld  $B_{\perp}$  kann zum Beispiel durch ein Helmholtzspulenpaar erzeugt werden, es besteht aber auch die Möglichkeit Wellenleitergeometrien mit Magnetfeldern zu erzeugen, die alle von langen stromdurchflossenen Drähten erzeugt werden. Solche Anordnungen sind in Abb.2.1 schematisch skizziert. Besonders deutlich wird das zugrundeliegende Prinzip in der ersten in Abb.2.2 gezeigten Anordnung (vgl. auch Abb.2.3): Der mittlere Leiter entspricht dem stromführenden Draht in Abb.2.1, die beiden äußeren Drähte, die in entgegengesetzter Richtung von Strom durchflossen werden, erzeugen das Kompensationsfeld, das zum Generieren des Feldminimums benötigt wird. Wir berechnen für diese Konfiguration die Stärke des Magnetfeldes in der Umgebung des Feldminimums. Die drei Drähte (der mittlere trage den Strom  $I_0$ , die beiden äußeren den Strom  $I_1$ ) liefern die Beiträge

$$\vec{B}(x, y, z) = \frac{\mu_0}{2\pi} \left[ I_0 \frac{z\vec{e}_y - y\vec{e}_z}{y^2 + z^2} - I_1 \frac{z\vec{e}_y - (y-d)\vec{e}_z}{(y-d)^2 + z^2} - I_1 \frac{z\vec{e}_y - (y+d)\vec{e}_z}{(y+d)^2 + z^2} \right] \quad (2.12)$$

Hierbei ist  $d$  der Abstand zweier Drähte. Wenn wir nun noch ein zusätzliches Offsetfeld  $\vec{B}_{\parallel}$  parallel zur  $x$ -Achse anlegen, findet man nach kurzer Rechnung für die Feldstärke in der Umgebung des Minimums (das sich im Abstand  $h$  vom Chip

befindet) in harmonischer Approximation

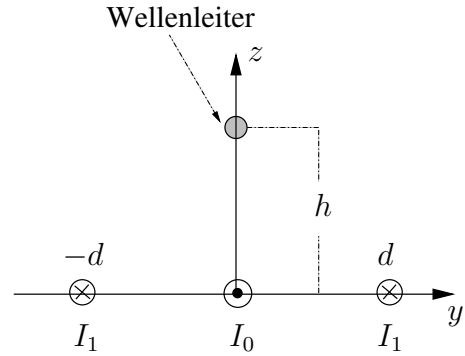
$$|\vec{B}(x, \delta y, h + \delta z)| = B_{\parallel} + \frac{m}{2\mu_b} \omega_{\perp}^2 (\delta y^2 + \delta z^2),$$

$$\text{mit } \omega_{\perp} = \sqrt{\frac{\mu_b}{mB_{\parallel}}} \frac{\mu_0 I_0}{2\pi d^2} \left( \sqrt{\frac{I_0}{I_1}} - 2\sqrt{\frac{I_1}{I_0}} \right)^2. \quad (2.13)$$

Der Abstand zwischen dem Wellenleiter und der Chipoberfläche ist gegeben durch

$$h = \frac{d}{\sqrt{2I_1/I_0 - 1}}. \quad (2.14)$$

Diese Anordnungen können leicht miniaturisiert werden, indem man nanotechnologisch fabrizierte Leiter verwendet, die auf eine Chipoberfläche aufgebracht sind. Um einen Einblick in die Größenverhältnisse zu geben, sei hier erwähnt, dass in der Arbeitsgruppe von C. Zimmermann in Tübingen eine Leiterstruktur zum Einsatz kommt, mit drei auf einer Chipoberfläche parallel verlaufenden Mikrodrähten von jeweils  $3\mu\text{m}$  Durchmesser [38]. Typische Distanzen  $h$  zwischen Chipoberfläche und Wellenleiter sind in der Größenordnung von  $10 - 300\mu\text{m}$  und die radialen Fallenfrequenzen reichen üblicherweise von  $0,1 - 10\text{kHz}$ . Die zugehörige radiale Ausdehnung des harmonischen Einschlusses ist durch die Oszillatorlänge gegeben und reicht von einigen Mikrometern bis ca  $100\text{nm}$ . Typischerweise fließen in den Drähten Ströme von wenigen Milliampère.



**Abbildung 2.3:** Eine Anordnung von drei in entgegengesetzte Richtung von Strom durchflossenen Drähten erzeugt einen Wellenleiter im Abstand  $h$  von der Chipoberfläche (die longitudinale Achse des Wellenleiters zeigt aus der Zeichenebene heraus).

Mit speziellen Methoden, auf die hier nicht eingegangen werden soll, können kalte Atome in solche Wellenleitergeometrien gebracht werden [70] und dort durch eine rasche Verstärkung des transversalen Einschlusspotentials in ein Bose-Einstein-Kondensat überführt werden [38]. Daher stellen diese Anordnungen perfekte miniaturisierte Labore dar, um kalte Atome bzw. Kondensate zu fangen, in Wellenleitern zu führen, und somit die Transporteigenschaften von kalten Atomen und Kondensaten zu untersuchen. Man nennt daher diese Anordnungen *Atom-Chips*.

### 2.2.2 Barrierenpotentiale und Punktkontakte

Wir zeigen im Folgenden Methoden auf, wie in einen uniformen Wellenleiter Barrierenpotentiale eingebaut werden können um, somit zum Beispiel quantenpunkt-kontaktähnliche Konfigurationen zu erzeugen. Dies ist von großer Relevanz, da wir im weiteren Verlauf der Arbeit den Transport von Kondensaten durch solche mesoskopischen Streupotentiale untersuchen werden.

Wir zeigen als erstes, wie durch eine leichte Modifikation der Anordnung mit den drei Stromleitern in Abb.2.3 der uniforme Wellenleiter derart modifiziert werden kann, so dass ein Quantenpunktkontakt entsteht (wir greifen dabei die Überlegungen in [55] auf). Die Stärke des transversalen Einschlusses ist durch die Frequenz  $\omega_\perp$  in (2.13) gegeben; ihr Betrag nimmt mit dem Inversen des quadrierten Abstandes zwischen den Drähten zu. Lassen wir also eine  $x$ -Abhängigkeit des Abstandes  $d = d(x)$  zu, so kann gemäß (2.13) die transversale Fallenfrequenz entlang der Longitudinalachse des Wellenleiters variiert werden. Das Einschlusspotential des Wellenleiters nimmt somit die Form

$$V(x, r) = \frac{1}{2} m (\omega_\perp(x))^2 r^2 \quad (2.15)$$

an. Durch die Variation des Abstandes  $d(x)$  verändert sich im Prinzip gemäß (2.14) auch die Distanz  $h$  zwischen dem Wellenleiter und dem Chip. Diese Krümmung des Wellenleiters induziert im Prinzip ein weiteres Barrierenpotential im Wellenleiter [71]. Ist diese Krümmung aber klein (d.h.  $\sigma$  muss genügend groß gegenüber der Abstandsvariation von  $d(x)$  gewählt werden), so können wir diesen Zusatzeffekt vernachlässigen.

Eine im weiteren Verlauf der Arbeit untersuchte Potentialform kann dadurch generiert werden, dass man folgende  $x$ -Abhängigkeit für den Abstand  $d(x)$  wählt

$$d(x) = \left[ \sqrt{\frac{\mu_b}{mB_0}} \frac{\mu_0 I_0}{2\pi (\omega_0 + \delta\omega e^{-x^2/\sigma^2})} \left( \sqrt{\frac{I_0}{I_1}} - 2\sqrt{\frac{I_1}{I_0}} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (2.16)$$

Das zugehörige transversale Einschlusspotential ist dann nämlich von der Form

$$V(x, r) = \frac{1}{2} m \left( \omega_0 + \delta\omega e^{-x^2/\sigma^2} \right)^2 r^2. \quad (2.17)$$

Dieses Potential nimmt für  $x \rightarrow \pm\infty$  die Form  $V(x, r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$  an und hat eine Gaußförmige Einschnürung bei  $x = 0$  mit maximaler Einschlussfrequenz  $\omega_\perp(x = 0) = \omega_0 + \delta\omega$ . Der Parameter  $\sigma$  gibt die longitudinale Ausdehnung der Einschnürung an. Die entsprechende Anordnung ist in Abb.2.4 skizziert (nicht eingezeichnet ist die nach (2.14) zu erwartende kleine Änderung der Distanz  $h(x)$ ). In Analogie zu mesoskopischen Leiterstrukturen, die auf dem Gebiet der

elektronischen Transportphysik [48,49] untersucht werden, nennen wir solche Einschnürungen von Wellenleitern *Quantenpunktkontakte*.

Eine andere Methode ein Barrierenpotential in einem Wellenleiter zu erzeugen, basiert auf dem Anbringen eines weiteren stromführenden Drahtes auf der Chipoberfläche, der senkrecht zur longitudinalen Achse des Wellenleiters verläuft. Experimentell können solche Querleiter implementiert werden, indem auf dem Basischip, der die drei Drähte zur Erzeugung des Wellenleiters trägt, ein kleinerer weiterer Chip appliziert wird, der die nun zusätzlich benötigten Drähte trägt. In Abb.2.5 ist diese Anordnung schematisch skizziert; hier trägt der Zusatzchip zwei weitere stromdurchflossene Drähte, die, wie wir im Weiteren gleich zeigen werden, zwei Barrieren im Wellenleiter generieren. Betrachten wir dazu den Einfluss eines einzelnen vom Strom  $I_q$  durchflossenen Querleiters und berechnen das von ihm im Wellenleiter zusätzlich induzierte Magnetfeld in einem Regime, wo das vom Querleiter erzeugte zirkulare Magnetfeld  $\vec{B}_q$  viel kleiner als das Offsetfeld  $\vec{B}_\parallel$  ist. Verläuft der Querleiter in Richtung der z-Achse, so gilt

$$\vec{B}_q = \frac{\mu_0 I}{2\pi} \frac{x\vec{e}_y + y\vec{e}_x}{x^2 + y^2}. \quad (2.18)$$

Das Gesamtmagnetfeld ist dann durch die Summe

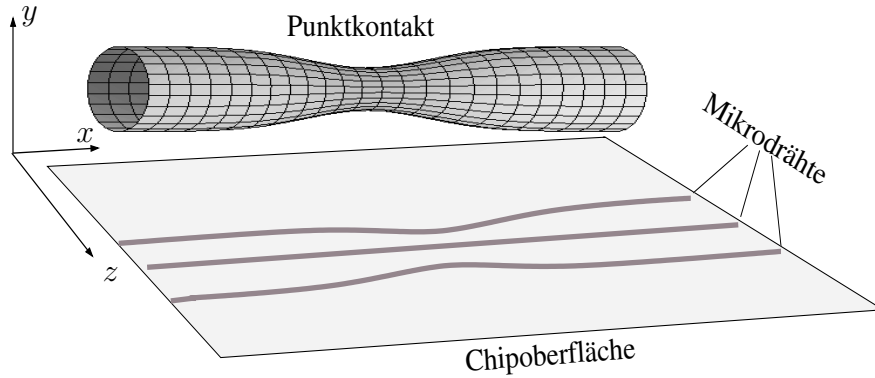
$$\vec{B}_{ges} = \vec{B}_0 + \vec{B}_\perp + \vec{B}_\parallel + \vec{B}_q \quad (2.19)$$

gegeben. Im Zentrum des Wellenleiters heben sich die Felder  $\vec{B}_0$  und  $\vec{B}_\perp$  gerade zu null auf. Darum ist das gesamte Magnetfeld entlang des Zentrums des Wellenleiters durch die Feldbeiträge  $\vec{B}_\parallel + \vec{B}_q$  gegeben. Das magnetische Potential für die Atome ist dort proportional zur Stärke des Magnetfeldes  $|\vec{B}| = \sqrt{B_\parallel^2 + B_q^2}$ . Wir werten diese Relation in dem Regime aus, wo das Offsetfeld viel größer als das vom Querleiter erzeugte Feld ist. Wir finden damit für  $B_\parallel \gg B_q$

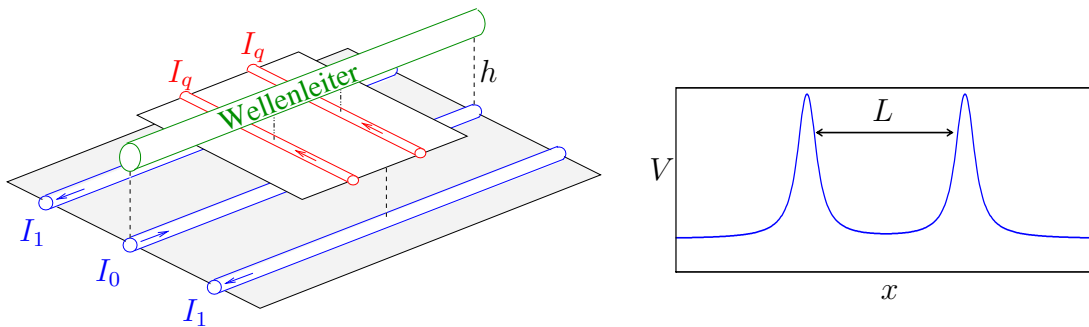
$$|\vec{B}| = \sqrt{B_\parallel^2 + 2B_\parallel \frac{\mu_0 I_q}{2\pi} \frac{\Delta h^2}{x^2 + \Delta h^2}} \approx B_\parallel + \frac{\mu_0 I_q}{2\pi} \frac{\Delta h^2}{x^2 + \Delta h^2}. \quad (2.20)$$

Hierbei ist  $\Delta h$  der Abstand zwischen dem Querleiter und dem Zentrum des Wellenleiters. Der zweite Term im Näherungsausdruck (2.20) stellt das eigentliche Barrierenpotential dar, weil  $B_\parallel^2$  ja lediglich ein konstanter Potential-Offset ist. Dieses Lorentzförmige Potential kann je nach Richtung des Stromflusses im Querleiter attraktiv oder repulsiv sein. Insbesondere kann man durch zwei parallel verlaufende Querleiter, wie in Abb.2.5 gezeigt, ein Doppelbarrierenpotential, das als Resonator für Materiewellen agiert (vgl. Abschnitt 5.2), im Wellenleiter erzeugen.

Neben diesen auf Magnetfeldern basierenden Barrierenpotentialen, wollen wir auch eine mögliche optische Realisierung hier kurz darstellen. Eine Gaußförmige Barriere kann nämlich erzeugt werden, indem man senkrecht zum Wellenleiter einen Laserstrahl einstrahlt, der sich in der transversalen Grundmode befindet; diese Grundmode hat ein radiales Gaußförmiges Intensitätsprofil  $I^s(r) =$



**Abbildung 2.4:** Dargestellt ist eine Chipoberfläche mit drei stromführenden Mikrodrähten, deren Abstand  $d$  lokal verringert wird. Über der Chipoberfläche ist eine Äquipotentialfläche des durch die Magnetfelder erzeugten Wellenleiterpotentials dargestellt. Der Wellenleiter ist asymptotisch ( $x \rightarrow \pm\infty$ ) uniform und weist eine Einschnürung auf, die einen Quantenpunktkontakt darstellt.



**Abbildung 2.5:** Links: Schema zur Anordnung von Mikrodrähten, um einen Wellenleiter mit einem Doppelbarrierenpotential zu erzeugen. Die drei blau gezeichneten Leiter generieren den Wellenleiter, die beiden rot eingezeichneten Querleiter jeweils eine Lorentzförmige Barriere. Im rechten Teilbild ist der Verlauf des Doppelbarrierenpotentials entlang des Zentrums des Wellenleiters aufgetragen.

$I_0^s \exp(-r^2/r_0^2)$  [72]. Ist nun die transversale Ausdehnung des harmonischen Wellenleiters, die durch die Oszillatorlänge charakterisiert ist, wesentlich kleiner, als die radiale Ausdehnung des Laserstrahls (bestimmt durch den Parameter  $r_0$ ), so wird im Wellenleiter das Potential

$$V(x) = V_0 \exp(-x^2/r_0^2), \quad \text{mit } V_0 = \frac{\hbar \Gamma^2 P}{4\pi r_0^2 I_0^s \delta\omega} \quad (2.21)$$

erzeugt. Hierbei ist  $\Gamma$  die natürliche Linienbreite und  $\delta\omega$  ist die Verstimmung der Laserfrequenz gegenüber der Resonanzfrequenz  $\omega_r = (E_e - E_g)/\hbar$  der Atome;  $I_0^s$  ist die Intensität des Lasers, und  $P$  die von ihm abgegebene Strahlungsleistung. Man erhält sie durch das Integral über die Intensität

$$P = 2\pi \int_0^\infty I_0^s \exp(-r^2/r_0^2) r dr = \pi I_0^s r_0^2. \quad (2.22)$$

Je nach Wahl der Frequenzverstimmung  $\delta\omega$  kann damit eine attraktive oder repulsive Gaußförmige Barriere erzeugt werden. Die Breite  $r_0$  dieser Barriere ist bei einer experimentellen Realisierung durch die Brennpunktfokussierung limitiert; es ist gegenwärtig möglich, den Laserstrahl so stark zu fokussieren, dass  $r_0$  die Ausdehnung von  $1\text{-}2\mu\text{m}$  erreichen kann [73]. Noch schmalere Barrierenpotentiale sind auf optischem Wege noch nicht realisierbar. Der große Vorteil dieser optischen Potentiale besteht darin, dass über die Frequenzverstimmung  $\delta\omega$  und die Leistung  $P$  die Stärke der Barriere einfach moduliert werden kann.

Vor allem die Kombination von magnetischen und optischen Fallen erlaubt es, eine Vielzahl hochinteressanter mesoskopischer Potentialstrukturen zu erzeugen. So sei hier erwähnt, dass durch zwei parallel mit Abstand  $L$  verlaufende Laserstrahle, die senkrecht einen magnetischen Wellenleiter kreuzen, ebenfalls ein Doppelbarrierenpotential erzeugt werden kann (vgl. Abschnitt 5.2). Des Weiteren kann eine periodische Gitterstruktur in einem Wellenleiter generiert werden, indem man mit zwei aufeinander gerichteten Lasern gleicher Frequenz eine stehende Lichtwelle erzeugt [3]. Des Weiteren können auch optische Unordnungspotentiale (so genannte *Speckle Potentiale*) mit einem magnetischen Wellenleiter kombiniert werden, um auf diese Weise ein quasi-eindimensionales Unordnungspotential in einem Wellenleiter zu erzeugen in welchen Expansions- und Transporteigenschaften von Kondensatwolken untersucht werden [30, 74].

## 2.3 Magnetische Unordnungspotentiale

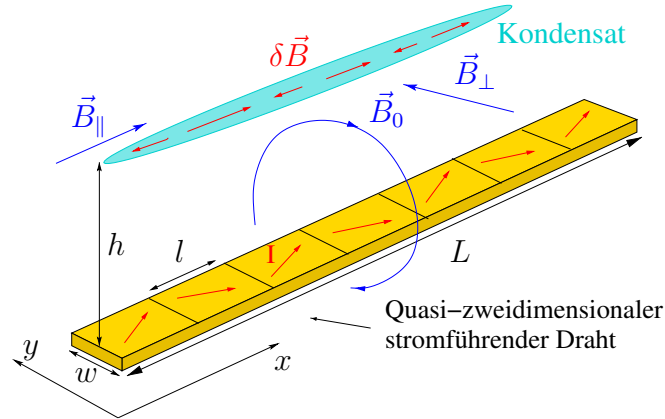
Bereits am Ende des letzten Abschnittes haben wir erwähnt, dass Unordnungspotentiale im Zusammenhang mit Bose-Einstein-Kondensaten von Relevanz sind.



Im Gegensatz zu den bereits erwähnten optisch erzeugten Unordnungspotentialen wenden wir uns nun magnetischen Unordnungspotentialen in Wellenleitern zu. In Abschnitt 2.2.1 wurden die grundlegenden Konzepte zur Erzeugung eines Materiewellenleiters mittels magnetischer Felder erklärt. Gehen wir noch einmal zu dem einfachsten Fall eines einzelnen, auf einer Chipoberfläche montierten stromführenden Mikrodrahtes zurück. Zusammen mit den externen Magnetfeldern  $\vec{B}_\perp$  und  $\vec{B}_\parallel$  formt das vom Draht erzeugte zirkulare Feld  $\vec{B}_0$  einen Wellenleiter. Bisher haben wir angenommen, dass es sich um einen idealen Leiter handelt, der weder laterale Ausdehnung, noch Fluktuationen der elektrischen Stromdichte aufweist. Tatsächlich handelt es sich dabei um eine Idealisierung, die nicht unbedingt der Wirklichkeit entsprechen muss. Typischerweise kommen auf Atomchipoberflächen quasi-zweidimensionale metallische Leiter zum Einsatz. Diese weisen in der Regel Störstellen, Oberflächenrauhigkeiten und weitere topologische Defekte auf, die zum Beispiel ein Artefakt der Produktion solcher quasi-zweidimensionaler Metallstrukturen sein können. Diese Imperfektionen können direkt durch elektronenmikroskopische Untersuchungen des Drahtes sichtbar gemacht werden [46].

Die Unvollkommenheiten des Drahtes stören den uniformen stationären Fluss der Stromdichte entlang des Leiters. Sie prägen dem Stromfluss einen mäandrierenden Verlauf auf, was zu örtlichen Fluktuationen der elektrischen Stromdichte führt. Es stellt sich somit ein zwar stationärer Zustand für die Stromdichte ein, diese weist aber örtliche Fluktuationen auf (wir betrachten in dieser Arbeit nicht den Fall zeitlich fluktuierender Ströme, die zu zeitabhängigen Unordnungspotentialen und Rauscheffekten führen [69, 75, 76]). Die Fluktuationen der Stromdichte führen zu einer zusätzlichen stationären, aber ungeordneten Magnetfeldkomponente im Wellenleiter, die ein zusätzliches Potential induziert, das auf die kalten Atome oder das Bose-Einstein-Kondensat wirkt. Dies ist schematisch in Abb.2.6 skizziert.

Dieses Unordnungspotential lässt sich direkt sichtbar machen, indem man kalte Atome oder ein Bose-Einstein-Kondensat in solch einen Wellenleiter bringt und die Dichteverteilung der Materie untersucht: Es zeigt sich, dass die Materie nicht mehr homogen entlang des Wellenleiters verteilt ist, sondern eine *Fragmentierung* des Kondensats eintritt [44, 77]. Es wurde zweifelsfrei nachgewiesen, dass dieser Fragmentierungseffekt auf das magnetische Unordnungspotential zurückzuführen ist [78]. Dieses mikroskopische Bild, das unserer Vorstellung von der physikalischen Realität zugrunde liegt wird auf das Vortrefflichste durch die Arbeiten von Schumm und Estève bestätigt: Durch die elektronenmikroskopische Vermessung der Leiterunvollkommenheiten (wie z.B. die Oberflächenrauhigkeit) konnte das durch diese erzeugte Unordnungsmagnetfeld errechnet und mit der Verteilung des Kondensats im Wellenleiter verglichen werden [46, 47]. Diese Arbeiten haben gezeigt, dass der Fragmentierungseffekt in der Tat auf die mikroskopischen Unvollkommenheiten des Drahtes zurückzuführen ist.



**Abbildung 2.6:** Schematische Skizze des Grundprinzips, um einen magnetischen Wellenleiter auf einem Atomchip zu erzeugen: Ein elektrischer Strom in einem quasi-zweidimensionalen metallischen Leiter und ein Kompensationsfeld  $\vec{B}_\perp$  erzeugen eine langgestreckte Mikrofalle. Unvollkommenheiten des Leiters zwingen den Strom, einem leicht mäandrierenden Verlauf zu folgen. Die daraus resultierenden (stationären) Stromdichtefluktuationen erzeugen eine magnetische Unordnungskomponente  $\delta\vec{B}$  im Zentrum des Wellenleiters.

Ausgehend von diesem Sachverhalt, entwickeln wir im Folgenden ein einfaches, phänomenologisches Modell für magnetische Unordnungspotentiale in Wellenleitern. Wir beschränken uns dabei auf *quasi-eindimensionale Wellenleiter*, das heißt, wir betrachten Wellenleiter deren transversale Ausdehnung  $a_\perp$  klein ist, verglichen mit der Längenskala, auf der das Unordnungspotential entlang der longitudinalen Achse des Wellenleiters variiert (vgl. auch Abschnitt 3.2). In diesem Regime hat das gesamte Potential  $V(x)$ , dem die Atome ausgesetzt sind, die einfache Form

$$V(x, r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + V_u(x), \quad (2.23)$$

wobei  $V_u(x)$  das im folgenden Abschnitt zu bestimmende Unordnungspotential ist.

### 2.3.1 Ein Modell für Unordnung

Wir betrachten nun eine stationäre Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r})$ , die durch einen dünnen quasi-zweidimensionalen Draht fließt. Aufgrund der Fehlerhaftigkeit des Drahtes variiert die Stromdichte als Funktion des Ortes  $\vec{r}$ . Wir zerlegen  $\vec{j}(\vec{r})$  in eine makroskopische konstante Komponente  $\vec{j}_0$ , die parallel zur Richtung des Drahtes fließt, und eine kleine Komponente  $\delta\vec{j}(\vec{r})$ , die lokale örtliche Abweichungen von der idealen Stromflussrichtung beschreibt

$$\vec{j}(\vec{r}) = j_0 \vec{e}_x + \delta\vec{j}(\vec{r}). \quad (2.24)$$

Im Zentrum des Wellenleiters heben sich das zirkulare Magnetfeld  $\vec{B}_0$ , das von der Stromdichte  $\vec{j}_0$  erzeugt wird, und das externe Feld  $\vec{B}_\perp$  genau auf. Da wir im quasi-eindimensionalen Regime arbeiten, genügt es, das Unordnungspotential im Zentrum des Wellenleiters zu bestimmen. Dort ist das gesamte Magnetfeld durch

$$\vec{B}(x, 0, h) = B_\parallel \vec{e}_x + \delta\vec{B}(x, 0, h) \quad (2.25)$$

gegeben, wobei  $\delta\vec{B} = \delta B_x \vec{e}_x + \delta B_y \vec{e}_y + \delta B_z \vec{e}_z$  mittels des *Biot-Savart* Gesetzes berechnet wird

$$\delta\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3\vec{r}' \frac{\delta\vec{j}(\vec{r}') \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}. \quad (2.26)$$

Das effektive Potential für die Atome ist proportional zum Betrag des Magnetfeldes

$$|\vec{B}| = \sqrt{(B_\parallel + \delta B_x)^2 + \delta B_y^2 + \delta B_z^2}. \quad (2.27)$$

Da wir  $\delta\vec{j}$  als klein angenommen haben, berücksichtigen wir nur Terme von erster Ordnung in  $\delta\vec{j}$ ; damit finden wir das einfache Ergebnis

$$|\vec{B}| = B_\parallel + \delta B_x. \quad (2.28)$$

Somit ist das Unordnungspotential entlang des Zentrums des Wellenleiters im Regime kleiner Stromdichtefluktuationen durch

$$V_u(x) = \mu_b \delta B_x(x, 0, h) \quad (2.29)$$

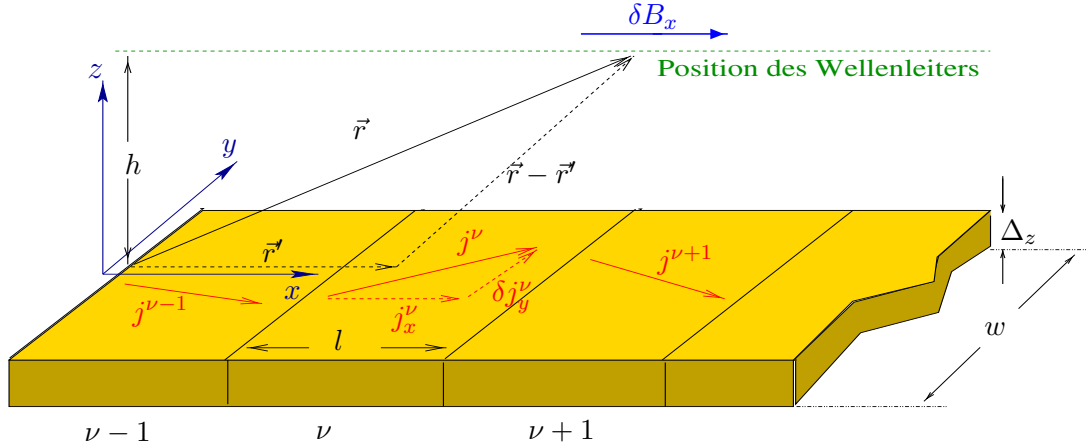
gegeben.

Wir betrachten jetzt einen quasi-zweidimensionalen Draht der Länge  $L$  in  $x$ -Richtung und mit Breite  $w$  in  $y$ -Richtung. Für eine exakte Beschreibung der Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r})$  würden wir ein genaues mikroskopisches Modell für die strukturelle Unordnung und die Störstellen im Draht benötigen [46, 79]. Hier in dieser Arbeit entwickeln wir einen einfacheren, phänomenologisch basierten Ansatz, der dann gültig ist, wenn die Längenskala  $l$ , auf der  $\vec{j}(\vec{r})$  fluktuiert, wesentlich kleiner ist, als der Abstand  $h$  zwischen Wellenleiter und Mikrodraht. Dazu teilen wir den Draht in  $\mathcal{N}$  gleiche Blöcke der Länge  $l$ , der Breite  $w$  und der Dicke  $\Delta_z$  auf (vgl Abb.2.7). Für jeden der Blöcke mit Volumen  $\mathcal{V}$  berechnen wir die gemittelte Stromdichte

$$\vec{j}^\nu = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz \int_{(\nu-1)l}^{\nu l} dx \int_{-w/2}^{w/2} dy \vec{j}(\vec{r}). \quad (2.30)$$

(Der Index  $\nu = 1, \dots, \mathcal{N}$  nummeriert die Blöcke und die zugehörigen mittleren Stromdichten  $\vec{j}^\nu$ .) Der gesamte elektrische Strom längs des Drahtes ist durch

$$I = \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz \int_{-w/2}^{w/2} dy \vec{j}(\vec{r}) \cdot \vec{e}_x = w \Delta_z \vec{j}^\nu \cdot \vec{e}_x \quad (2.31)$$



**Abbildung 2.7:** Aufteilung des Drahtes in gleichgroße Blöcke der Länge  $l$ , Breite  $w$  und Dicke  $\Delta_z$ . Für jeden Block berechnen wir eine gemittelte Stromdichte  $\vec{j}^\nu$ . Die Stromdichtekomponente parallel zur  $y$ -Richtung ist die Ursache des magnetischen Unordnungspotentials entlang des Wellenleiters.

gegeben. Somit ist im Falle eines stationären elektrischen Stromes  $I$ , die  $x$ -Komponente von  $\vec{j}^\nu$  gleich dem konstantem Wert  $j_0$  in Gleichung (2.24), und es gilt (für alle  $\nu$ )

$$\vec{j}^\nu = j_0 \vec{e}_x + \delta j_y^\nu \vec{e}_y + \delta j_z^\nu \vec{e}_z. \quad (2.32)$$

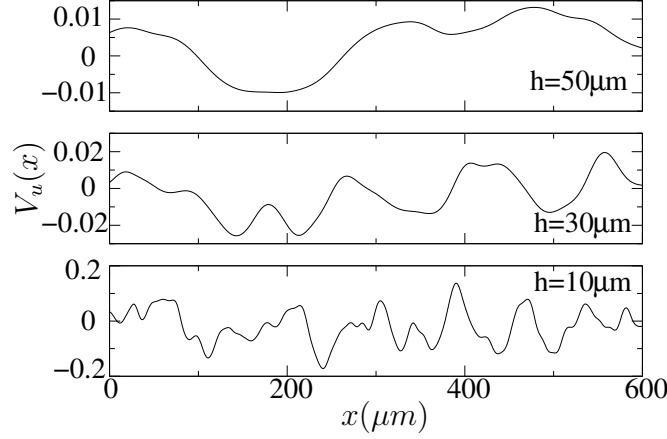
Wir nehmen an, dass die Dicke  $\Delta_z$  des Drahtes sehr viel kleiner als alle anderen relevanten Längenskalen ist. Daraus folgern wir, dass  $|\delta j_z^\nu| \ll |\delta j_y^\nu|$  gilt und wir vernachlässigen im Folgenden den Beitrag von  $\delta j_z^\nu$  zum Unordnungspotential. Damit finden wir

$$V_u(x) = \mu_b \sum_{\nu=1}^N \delta B_x^\nu(x, 0, h), \quad (2.33)$$

wobei der Magnetfeldbeitrag des  $\nu$ -ten Blocks am Zentrum des Wellenleiters mittels des Biot-Savart Gesetzes errechnet wird

$$\begin{aligned} \delta B_x^\nu &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{(\nu-1)l}^{\nu l} dx' \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} dy' \frac{\Delta_z h \delta j_y^\nu}{[(x-x')^2 + h^2 + y'^2]^{3/2}} \\ &= \frac{\mu_0 \Delta_z}{2\pi} \delta j_y^\nu \left[ \arctan \left( \frac{w u / (2h)}{\sqrt{u^2 + h^2 + w^2/4}} \right) \right]_{x-\nu l}^{x-(\nu-1)l}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Die eben beschriebene Diskretisierungsprozedur erlaubt es uns nun, in einfacher Art und Weise Unordnung im System zu modellieren, indem wir  $\delta j_y^\nu$  als Zufallsvariable benutzen. Wir nehmen an, dass  $\delta j_y^\nu$  im Intervall  $[-(3\sigma^2/2l)^{1/2}, (3\sigma^2/2l)^{1/2}]$  uniform verteilt sei. Diese Annahme impliziert, dass kein mittlerer Strom entlang



**Abbildung 2.8:** Numerisch errechnete repräsentative Beispiele für Unordnungrealisierungen bei verschiedenen Abständen  $h$  zwischen Wellenleiter und Mikrodraht. Die Bilder zeigen den Übergang von schwacher zu starker Unordnung, bei abnehmendem Abstand  $h$ . Die Stärke des Unordnungspotentials ist in Einheiten von  $\mu_0 \mu_B w \Delta_z \sigma / (2\pi)$  aufgetragen.

der  $y$ -Achse fließt ( $\langle \delta j_y^\nu \rangle = 0$ ), und dass eine  $\delta$ -Korrelation

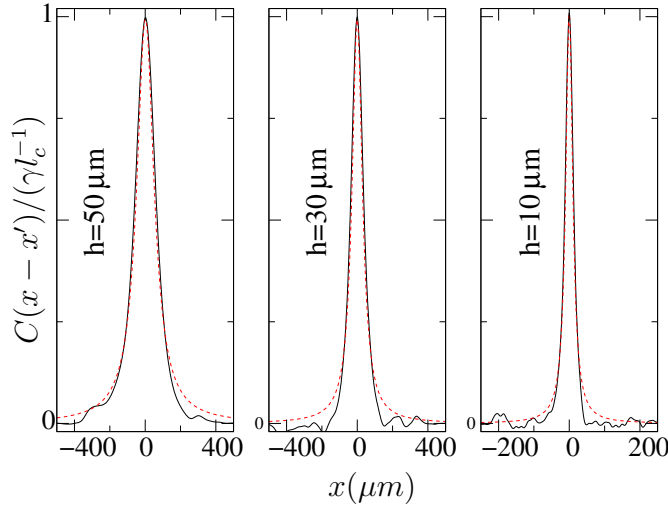
$$\langle \delta j_y^\nu \delta j_y^{\nu'} \rangle = \frac{\sigma^2}{l} \delta_{\nu, \nu'} , \quad (2.35)$$

für die Fluktuationen angenommen wird. Das heißt, in unserem einfachen Modell sind die Stromdichtefluktuationen von Block zu Block völlig unkorreliert (weißes Rauschen). Die Korrelation (2.35) ermöglicht einen wohldefinierten Übergang  $l \rightarrow 0$ . In diesem Limes wird  $\delta j_y^\nu$  durch eine kontinuierliche  $x$ -abhängige Größe  $\delta j_y(x)$  ersetzt; es gilt dann

$$\langle \delta j_y(x) \delta j_y(x') \rangle = \sigma^2 \delta(x - x') . \quad (2.36)$$

Dabei definiert der Parameter  $\sigma$  eine typische Größenskala für die Abweichungen der Stromdichte vom homogenen Stromdichtefluss  $j_0$ . Da diese Fluktuationen  $\delta j_y$  sicherlich proportional zu  $j_0 = I/(w \Delta_z)$  sind, können wir  $\sigma = j_0 \sqrt{\ell^*}$  schreiben. Hierbei ist  $\ell^*$  eine charakteristische Länge, die von den Eigenschaften des Metalldrahtes abhängt;  $\ell^*$  ist somit ein phänomenologischer Parameter, der im Prinzip experimentell ermittelbar ist.

Aufgrund der Faltung in Gleichung (2.34) erzeugt die kurzreichweitige, da  $\delta$ -korrelierte Unordnung der örtlichen Stromfluktuationen ein glattes langreichweitiges Unordnungspotential  $V_u(x)$  entlang des Materiewellenleiters. Dies zeigt sich deutlich in Abb.2.8; dort zeigen wir typische Realisierungen von Unordnungspotentialen, die mittels numerisch generierter Zufallsverteilung von Stromdichten  $j_y^\nu$  für drei verschiedene Abstände  $h$  errechnet wurden. Wir stellen unmittelbar fest, das Unordnungspotential wird glatter für große Abstände  $h$  und wird rauher (und seine Potentialstärke nimmt zu) wenn  $h$  kleiner wird.



**Abbildung 2.9:** Numerisch berechnete Korrelationsfunktionen für verschiedene Abstände  $h$  zwischen Wellenleiter und der Chipoberfläche (durchgezogene Linien). Gestrichelte Linien: Fit an eine Lorentzkurve.

### 2.3.2 Eigenschaften des Unordnungspotentials

Wir untersuchen nun die Eigenschaften des im letzten Abschnitt eingeführten Unordnungspotentials mit  $\delta$ -korrelierten Stromdichtefluktuationen. Zunächst stellen wir fest, dass aufgrund der Eigenschaft  $\langle \delta j_y^\nu \rangle = 0$  für das Potential  $\langle V_u(x) \rangle = 0$  gilt. Eine geeignete Größe, um die Eigenschaften von  $V_u(x)$  zu beschreiben, ist durch die Korrelationsfunktion

$$C(x - x') = \langle V_u(x) V_u(x') \rangle \quad (2.37)$$

gegeben. Wir untersuchen diese Größe zunächst rein numerisch, indem wir über eine große Anzahl von numerisch generierten Unordnungsrealisierungen (typischerweise  $10^4$  Realisierungen) mitteln. In Abb.2.9 zeigen wir numerisch errechnete Ergebnisse für  $C(x - x')$  bei verschiedenen Abständen  $h$ . Wir finden, dass die Korrelationsfunktionen mit guter Genauigkeit durch eine Lorentzkurve gefittet werden können

$$C(x - x') \simeq \frac{\gamma l_c}{l_c^2 + (x - x')^2}. \quad (2.38)$$

Diese Tatsache erlaubt es uns, die Korrelationslänge  $l_c$  von  $C(x - x')$  zu extrahieren und somit einen empirischen Zusammenhang zwischen der Höhe  $h$  und der Korrelationslänge  $l_c$  herzustellen. Ist die Breite  $w$  des Drahtes von der gleichen Größenordnung wie die Diskretisierungslänge  $l$ , so finden wir, dass  $l_c$  linear vom Abstand  $h$  abhängt,  $l_c \simeq sh$ , mit dem Proportionalitätsfaktor  $s$ , der typischerweise zwischen 1 und 2 variiert. Für den experimentell relevanten Fall  $w = 4 \mu\text{m}$  finden wir  $s = 1.2$  (ein Mikrodraht dieser Breite wurde von Ott *et al.* realisiert [38]).

Formal können wir dieses Ergebnis folgendermaßen verstehen: Im Kontinuumslimit  $l \rightarrow 0$  (und im idealisierten Fall eines unendlich langen Drahtes) nimmt im Regime  $w \gg h$  (2.33) die einfache Form

$$V_u(x) = \frac{\mu_b \mu_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{h \Delta_z \delta j_y(x')}{(x - x')^2 + h^2} \quad (2.39)$$

an. In diesem Fall ist das Unordnungspotential exakt Lorentzkorreliert; es gilt dann  $l_c = 2h$  und  $\gamma = \pi^{-1}(\mu_0 \mu_b \Delta_z \sigma / 2)^2$ . Im entgegengesetzten Grenzfall  $w \ll h$  kann die Korrelationfunktion nicht analytisch berechnet werden, dafür aber ihre Fouriertransformierte

$$C_q = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i q x) C(x) dx. \quad (2.40)$$

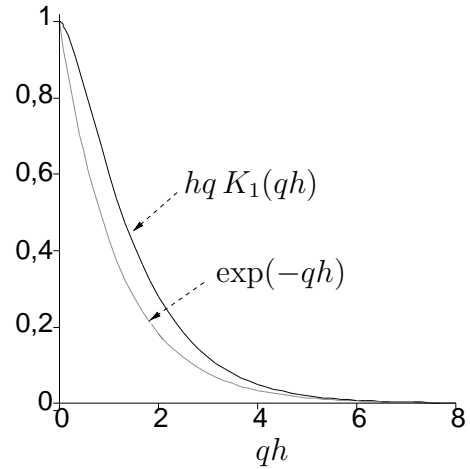
Man findet nach kurzer Rechnung

$$C_q = \left( \frac{\mu_0 \mu_b w \Delta_z \sigma}{2\pi} \right)^2 \left[ h q K_1(qh) \right]^2, \quad (2.41)$$

wobei  $K_1$  die modifizierte Besselfunktion erster Art ist [80]. Das Ergebnis (2.41) für  $C_q$  unterscheidet sich nicht stark von der Fouriertransformierten einer Lorentzfunktion (für die Lorentzkurve fände man eine abfallende Exponentialfunktion). Die Abb.2.10 illustriert, dass der Unterschied zwischen dem Term  $h q K_1(qh)$  und einer Exponentialfunktion  $\exp(-qh)$  nicht groß ist. Dies ist der Grund, warum  $C(x - x')$  in angemessener Art und Weise auch im Regime  $h \gg w$  durch eine Lorentzkurve gefittet werden kann. Um einen akzeptablen Lorentz-Fit zu finden, kann man zum Beispiel versuchen, die Werte  $C(0)$  und  $C''(0)$ , die man aus Gleichung (2.41) erhält, zu reproduzieren, indem man folgende geeignete Werte für die Parameter  $\gamma$  und  $l_c$  wählt:  $C(0) = \gamma/l_c$  und  $C''(0) = -2\gamma/l_c^3$ . Dies führt zu der Relation

$$\frac{l_c}{h} = \left[ \frac{2 \int_0^{+\infty} t^2 K_1^2(t) dt}{\int_0^{+\infty} t^4 K_1^2(t) dt} \right]^{1/2} \simeq 1.46. \quad (2.42)$$

Damit finden wir auch im Kontinuumslimit, dass  $l_c$  proportional  $h$  ist,  $l_c \simeq s h$  mit  $s \simeq 1.46$ .



**Abbildung 2.10:** Vergleich der Funktionen  $h q K_1(qh)$  und  $\exp(-qh)$

Das Hauptergebnis dieser Diskussion ist, dass im Kontinuumslimit in beiden Grenzfällen,  $w \ll h$  und  $w \gg h$ , und ebenfalls bei der numerischen Implementierung des Unordnungspotentials mit endlicher Blocklänge  $l$  ein Lorentz-artig korreliertes Unordnungspotential gefunden wird. Die Korrelationslänge  $l_c$  ist proportional zum Abstand  $h$  zwischen Wellenleiter und Draht, wobei der Proportionalitätsfaktor zwischen 1 und 2 variiert. Dies wird experimentell, durch detaillierte Untersuchungen in der Arbeitsgruppe von A. Aspect bestätigt [46].

Das hier eingeführte Unordnungspotential, das  $\delta$ -korrelierte Fluktuationen der Stromdichte entlang des quasi-zweidimensionalen Drahtes annimmt, beschreibt physikalisch gesehen einen *schmutzigen Leiter*, der sehr viele Störstellen und topologische Unvollkommenheiten aufweist und daher zu einer sehr sprunghaften Stromdichte entlang des Leiters führt. Wir halten fest, dass diese  $\delta$ -korrelierten Stromdichtefluktuationen zu einem Unordnungspotential führen, dessen Amplitude im Kontinuumslimit im Grenzfall  $h \gg w$  dem Skalengesetz

$$\langle V^2(x) \rangle^{1/2} \propto I h^{-3/2} \quad (2.43)$$

gehört. Dies steht allerdings nicht ganz im Einklang mit den experimentellen Ergebnis,  $I h^{-2.2}$ , von Kraft *et al.* [78].

Im Gegensatz zu unserem Modell wurde in [79] das Modell eines *sauberen Drahtes*, der lediglich geriffelte Ränder aufweist, ansonsten aber keine weitere Defekte hat, eingeführt. Mit diesem Modell findet man unter der Annahme, dass die topologische Oberflächenrauigkeit an den Rändern des Leiters  $\delta$ -korreliert ist, ein Skalengesetz der Form  $I h^{-5/2}$ , was besser mit dem experimentellen Resultaten aus [78] übereinstimmt. Allerdings zeigen die Arbeiten von Estève *et al* [46], dass die Annahme einer  $\delta$ -korrelierten Rauigkeit der Ränder experimentell nicht korrekt ist, und dass die Amplitude des Unordnungspotentials weniger stark als mit  $I h^{-5/2}$  abfällt. Des Weiteren ist die Korrelationsfunktion (2.41), die aus dem Modell eines schmutzigen Drahtes resultiert, in besserer Übereinstimmung mit der in [46] experimentell gefundenen Korrelationsfunktion, da im Gegensatz zu unseren Vorhersagen, die in [79] gefundene Korrelation das Verhalten  $C_{q=0} = 0$  aufweist und ein lokales Maximum bei einem endlichem Wellenvektorwert  $q$  hat. Daher ist es wohl gerechtfertigt am Ende dieses Abschnitts festzuhalten, dass es das hier eingeführte Unordnungsmodell erlaubt, ein Unordnungspotential zu erzeugen, das die meisten wesentlichen Charakteristika für Unordnung in magnetischen Materiewellenleiter über Atom-Chips beinhaltet, wenn man *schmutzige Leiter* verwendet.

In Kapitel 5.3 kommen wir auf das hier entwickelte Unordnungsmodell zurück, wenn wir den Transport eines Bose-Einstein-Kondensat durch magnetische Unordnungspotentiale in Wellenleitern untersuchen.



# Kapitel 3

## *Mean-Field* Theorie für Kondensate

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der *Mean-Field* - Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten. Wir skizzieren dazu zunächst, wie die Gross-Pitaevskii-Gleichung aus einem allgemeinen feldtheoretischen Ansatz hergeleitet werden kann. Des Weiteren leiten wir eine effektive eindimensionale Version der Gross-Pitaevskii-Gleichung her, die besonders geeignet ist, Kondensate in Wellenleitergeometrien zu beschreiben. Wir betrachten in diesem Kapitel schließlich noch die stationären Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung in einem uniformen Wellenleiter und zeigen, dass sich das Verhalten dieser stationären Moden mit einem System von Hamiltonschen Bewegungsgleichungen beschreiben lässt.

### 3.1 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

In diesem Abschnitt behandeln wir die *Mean-Field* Beschreibung von Bose-Einstein Kondensaten und geben eine kurze Herleitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung an. Wir folgen hierbei weitgehend den Übersichtsartikeln [59, 81] und dem Buch von Pitaevskii und Stringari [3]. Wir gehen von dem Vielteilchen Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \end{aligned} \quad (3.1)$$

aus, welcher ein System von  $N$  wechselwirkenden Bosonen beschreibt. Hierbei ist  $V$  ein äußeres Potential, das auf die Bosonen wirkt und  $\hat{\Psi}(\vec{r})$  und  $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$  sind die bosonischen Feldoperatoren, die ein Teilchen am Ort  $\vec{r}$  vernichten bzw. erzeugen.

Das Wechselwirkungspotential  $\mathcal{U}(\vec{r}-\vec{r}')$  beschreibt die Wechselwirkung zwischen zwei Bosonen. Da wir das Regime untersuchen wollen, in dem die Reichweite der Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen viel kleiner als der mittlere Abstand ist, können wir im Folgenden Wechselwirkungsprozesse, in die drei oder mehr Teilchen involviert sind vernachlässigen. Wir entwickeln nun den Feldoperator  $\hat{\Psi}(\vec{r})$  nach Ein-Teilchen-Wellenfunktionen  $\psi_i$  (hierbei ist  $i$  der Teilchenindex)

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_i \psi_i(\vec{r}) \hat{a}_i. \quad (3.2)$$

Die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}_i^\dagger$  und  $\hat{a}_i$  sind im Fockraum durch

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_0, n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_i |n_0, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_0, n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

definiert; hierbei sind die  $n_i$  die Eigenwerte der Teilchenzahloperatoren  $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ , sie können die Werte  $n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$  annehmen. Da es sich um bosonische Erzeuger und Vernichter handelt, lauten die Vertauschungsregeln folgendermaßen

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0. \quad (3.4)$$

Hauptcharakteristikum für ein Bose-Einstein Kondensat ist die makroskopische Besetzung des Grundzustandes  $i = 0$ , d.h.  $N_0 \equiv n_0 \gg 1$ . Hierbei bleibt im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  das Verhältnis  $N_0/N$  zwischen der Anzahl der kondensierten Teilchen und Gesamtteilchenzahl  $N$  endlich. In diesem Limes entsprechen die Zustände mit  $N_0$  und  $N_0 + 1$  kondensierten Teilchen der selben physikalischen Situation und die beiden Operatoren  $\hat{a}_0$  und  $\hat{a}_0^\dagger$  können näherungsweise durch komplexe Zahlen ersetzt werden:  $\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0}$ . Betrachten wir ein homogenes Bosegas im Volumen  $\mathcal{V}$ ; dieses kondensiert im Grundzustand  $\psi_0 = 1/\sqrt{\mathcal{V}}$ . Der Feldoperator lässt sich dann in der Form

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{N_0}{\mathcal{V}}} + \hat{\Psi}'(\vec{r}) \quad (3.5)$$

schreiben, wobei  $\hat{\Psi}'(\vec{r})$  Anregungen aus dem Kondensat beschreibt. (Für den Fall eines homogenen Bose-Einstein-Kondensats gehorchen diese Anregungen der Bogoliubov-Dispersionsrelation [3]).

Diese Aufteilung in einen kondensierten und nicht-kondensierten Anteil lässt sich auf den Fall inhomogener Bosegase verallgemeinern; dazu schreiben wir:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) + \hat{\Psi}'(\vec{r}, t), \quad (3.6)$$

(es ist nun explizit eine zeitliche Dynamik zugelassen). Hierbei ist  $\Phi(\vec{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle$  der Erwartungswert des Feldoperators (dieser Erwartungswert ist bezüglich eines kohärenten Zustandes definiert [82, 83]). Die Teilchendichte des Kondensats ist dann durch

$$n_0(\vec{r}, t) = |\Phi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.7)$$

gegeben. Bei der Größe  $\Phi(\vec{r}, t)$ , die eine wohldefinierte Phase hat, handelt es sich um ein klassisches Feld; sie stellt somit den Ordnungsparameter des Kondensats, der auch als Kondensatwellenfunktion bezeichnet wird, dar.

Um eine Wellengleichung für die Kondensatwellenfunktion  $\Phi(\vec{r}, t)$  zu erhalten, untersuchen wir die Zeitentwicklung des Feldoperators mittels der Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= [\hat{\Psi}, \hat{H}] \\ &= \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Unter der Annahme, dass der Beitrag des Feldoperators  $\hat{\Psi}'(\vec{r}, t)$  vernachlässigbar klein gegenüber dem Beitrag der Kondensatwellenfunktion  $\Phi$  ist, können wir in (3.8) den Feldoperator  $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$  durch das klassische Feld  $\Phi(\vec{r}, t)$  ersetzen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) &= [\phi, \hat{H}] \\ &= \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \phi^*(\vec{r}', t) \mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r}) \phi(\vec{r}', t) \right] \phi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Betrachten wir nun das Bose-Einstein-Kondensat bei einer Temperatur weit unterhalb der Kondensationstemperatur  $T_c$ . Dann ist die thermokinetische Energie der Bosonen wesentlich kleiner als die charakteristische Energie der Teilchen-Teilchen Wechselwirkung  $\mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r})$ . In diesem energetischen Regime kann man mittels einer Partialwellenentwicklung [65] zeigen, dass bei einem Streuprozess zwischen zwei Teilchen der Beitrag der s-Wellenstreuung dominiert und alle höheren Beiträge vernachlässigt werden können [81, 84]. Da wir uns mit dem Regime geringer Kondensatdichten beschäftigen wollen, ist die Reichweite des Potentials  $\mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r})$  viele kleiner als der mittlere Abstand zweier Teilchen. Somit spielt nur das asymptotische Verhalten des Potentials eine Rolle, und die Streuung wird alleine durch die s-Wellenstreuulänge  $a_s$  charakterisiert. In diesem Regime können wir das Wechselwirkungspotential durch

$$\mathcal{U}(\vec{r}' - \vec{r}) = U_0 \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (3.10)$$

ersetzen; die Stärke der Wechselwirkung wird durch die Kopplung

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (3.11)$$

bestimmt. Nehmen wir nun aber ein Kontaktpotential der Form (3.10) an, so vereinfacht sich die Bewegungsgleichung (3.9) zu

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + U_0|\Phi(\vec{r}, t)|^2 \right] \Phi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{r}, t). \quad (3.12)$$

Dies ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung, sie beschreibt das makroskopische Verhalten des Systems über Abstände, die wesentlich größer sind als der mittlere Abstand zweier Teilchen. Zudem wurde vorausgesetzt, dass die Temperatur  $T$  des Systems sehr viel kleiner als die Kondensationstemperatur  $T_c$  ist, da sonst die Wechselwirkung des Kondensats mit einer thermischen Wolke berücksichtigt werden müsste. Wir betrachten in dieser Arbeit aber lediglich den idealisierten Grenzfall  $T = 0$ .

Die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung erhalten wir durch den Separationsatz  $\Phi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \exp(-i\mu t/\hbar)$ ; setzt man dies in (3.12) ein, so findet man die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + U_0|\Phi(\vec{r})|^2 \right] \Phi(\vec{r}) = \mu\Phi(\vec{r}). \quad (3.13)$$

Wir skizzieren kurz eine alternative Herleitung [51] der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung: Ausgehend von der Überlegung, dass im Zustand vollständiger Kondensation aller  $N$  Bosonen, sich alle Teilchen im gleichen Ein-Teilchen-Zustand  $\psi(\vec{r})$  befinden, können wie die  $N$ -Teilchen Wellenfunktion als das Produkt der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen ansetzen

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi(\vec{r}_i). \quad (3.14)$$

Die Energie des Zustandes (3.14) ist durch das Energiefunktional

$$E[\Psi] = N \int d^3\vec{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(\vec{r})|^2 + V(\vec{r})|\psi(\vec{r})|^2 + N\frac{U_0}{2} |\psi(\vec{r})|^4 \right) \quad (3.15)$$

gegeben. Wir führen wieder die Kondensatwellenfunktion  $\Phi(\vec{r})$  ein

$$\Phi(\vec{r}) = \sqrt{N} \psi(\vec{r}). \quad (3.16)$$

Damit lautet das Energiefunktional (3.15)

$$E[\Phi] = \int d^3\vec{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi(\vec{r})|^2 + V(\vec{r})|\Phi(\vec{r})|^2 + \frac{U_0}{2} |\Phi(\vec{r})|^4 \right). \quad (3.17)$$

Für  $\Phi(\vec{r})$  gilt die Normierungsbedingung

$$N = \int d^3\vec{r} |\Phi(\vec{r})|^2. \quad (3.18)$$

Wir minimieren das Energiefunktional (3.17) mittels Variation nach  $\Phi$  bzw  $\Phi^*$ . Mit der Nebenbedingung (3.18) lautet der Variationsansatz

$$\delta E - \mu \delta N = 0. \quad (3.19)$$

Der Lagrange Multiplikator  $\mu$  ist das chemische Potential;  $\mu$  gibt an, welche Energie benötigt wird, um zu einem System mit  $N$  Teilchen ein weiteres hinzuzufügen. Aus dem Ansatz (3.19) findet man nach kurzer Rechnung die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\Phi(\vec{r}) + U_0 |\Phi(\vec{r})|^2 \Phi(\vec{r}) = \mu \Phi(\vec{r}). \quad (3.20)$$

Den üblichen Konventionen in der Literatur folgend, bezeichnen wir ab jetzt den Ordnungsparameter  $\Phi(\vec{r}, t)$  als Kondensatwellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$ .

## 3.2 *Mean-Field* Theorie im Materiewellenleiter

Im Rahmen dieser Arbeit werden wir oft Transportprozesse von Kondensaten untersuchen, die sich durch eine effektive eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung beschreiben lassen. Wir erklären deswegen im Folgenden, wie man zu einer effektiv eindimensionalen Beschreibung für den *Mean-Field* Kondensatzustand im Wellenleiter gelangt. Dazu betrachten wir Kondensate im so genannten quasi-eindimensionalen Regime, das für den besonders relevanten Fall eines zylindersymmetrischen harmonischen Materiewellenleiters durch die Ungleichungen

$$\left(\frac{a_s}{a_\perp}\right)^2 \ll n a_s \ll \left(\frac{a_\perp}{a_s}\right)^2 \quad (3.21)$$

definiert wird [20,85]. Dabei ist  $a_\perp = \sqrt{\hbar/(\omega_\perp m)}$  die harmonische Oszillatorlänge, die ein charakteristisches Maß für die laterale Ausdehnung des Wellenleiters ist;  $n$  ist die longitudinale Dichte, die angibt, wieviele Teilchen pro Längeneinheit entlang des Wellenleiters gefunden werden (vgl. 3.23). Die erste dieser beiden Ungleichungen stellt sicher, dass das System nicht den Tonks-Girardeau Grenzfall erreicht [85–88], indem der Wellenleiter so schmal wird, dass die Translationsbewegung der bosonischen Atome entlang des Wellenleiters durch ihre interatomare Wechselwirkung unterbunden wird. Die zweite Ungleichung wird benötigt, um sicherzustellen, dass das Kondensat sich im energetisch niedrigsten Transversalzustand befindet [20, 59, 71]. Um die Notation zu vereinfachen, ersetzen wir ab hier  $\omega_\perp$  durch das Symbol  $\omega$ .

### 3.2.1 Effektiv eindimensionale Gleichung

In dieser Arbeit betrachten wir vorwiegend Transportprozesse in Wellenleitern. Die charakteristische Eigenschaft dieser mesoskopischen Potentialstrukturen liegt darin, dass die typische Längenskala, auf der das Potential entlang der longitudinalen Achse variiert, wesentlich größer ist als die charakteristische Breite des transversalen Einschlusses. Wir leiten in diesem Kapitel eine effektive eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung für Bose-Einstein-Kondensate in solchen Potentialstrukturen her. Wir gehen dazu von der dreidimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + U_0|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.22)$$

aus. Hierbei ist  $V(\vec{r}) \equiv V(x, y, z)$  das Wellenleiterpotential, wobei  $x$  die Koordinate der longitudinalen Achse sei;  $y$  und  $z$  seien die Koordinaten der beiden transversalen Freiheitsgrade.

Wir betrachten nun ein propagierendes Bose-Einstein-Kondensat in diesem Wellenleiter und führen die lokale longitudinale Teilchendichte  $n(x, t)$  ein,

$$n(x, t) = \int dydz |\Psi(x, y, z, t)|^2. \quad (3.23)$$

Die Dynamik des Kondensates in diesem System wird durch zwei charakteristische Zeiten bestimmt: Von Relevanz ist zum einen die Zeit  $\tau_{lo}$ , die das Kondensat benötigt, um an einem gegebenen Punkt entlang der longitudinalen Achse vorbei zu propagieren; dies definiert die charakteristische Zeitskala, auf der die longitudinale Dichte  $n(x, t)$  variiert. Die zweite Zeit  $\tau_{tr}$  bestimmt die Größenordnung der Zeitskala auf der das Kondensat bei einer Variation von  $n(x, t)$  sein transversales Dichteprofil einer neuen Gleichgewichtskonfiguration anpasst. Betrachtet man ein Kondensat in einer Wellenleiterstruktur, dessen longitudinale Ausdehnung viel größer ist, als seine typische transversale Ausdehnung, und dessen zeitliche Dynamik längs der Longitudinalachse langsam, im Vergleich zur Dynamik der transversalen Freiheitsgrade abläuft, so können wir davon ausgehen, dass gilt

$$\tau_{tr} \ll \tau_{lo}. \quad (3.24)$$

Diese Ungleichung definiert den *Grenzfall adiabatischer Wellendynamik*. In diesem Regime können wir für die Wellenfunktion den Separationsansatz

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(x, t)\phi(y, z, n(x, t)) \quad (3.25)$$

verwenden, wobei  $\phi$  die Gleichgewichtswellenfunktion für die transversalen Freiheitsgrade ist;  $\phi(y, z, n)$  ist wegen der Zeitabhängigkeit von  $n$  implizit zeitabhängig. Die Wellenfunktion  $\phi$  sei auf eins normiert,

$$\int |\phi|^2 dydz = 1, \quad (3.26)$$

darum folgt aus (3.23) und (3.25), dass  $|\psi|^2 = n$  gilt. Wegen der Normierungsbedingung (3.26) folgt, dass im adiabatischem Grenzfall

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi = 0, \quad \frac{\partial}{\partial x}\phi = 0 \quad (3.27)$$

gelten muss.

Um das adiabatische Regime zu erreichen, fordern wir, dass  $V(x, y, z)$  entlang der Longitudinalachse des Wellenleiters nur langsam variieren soll. Diese Bedingung implementieren wir durch die Bedingung, dass die typische Längenskala auf der sich  $V$  längs der Longitudinalachse ändert, viel kleiner sein soll als die laterale Ausdehnung  $a_\perp$  des Wellenleiters ( $a_\perp$  ist die Oszillatorlänge des harmonischen transversalen Einschlusses). Setzen wir, unter Berücksichtigung von (3.27), den Ansatz (3.25) in die Gross-Pitaevskii-Gleichung (3.22) ein, so finden wir

$$i\hbar\phi\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi\frac{\partial^2}{\partial y^2}\phi + \psi\frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi + \phi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\right) + V\psi\phi + U_0|\psi|^2|\phi|^2\psi\phi, \quad (3.28)$$

bzw. leicht umgeformt

$$i\hbar\phi\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\phi\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \psi\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V + U_0|\psi|^2|\phi|^2\right]\phi. \quad (3.29)$$

Wir identifizieren den Term in eckigen Klammern als den effektiven Hamiltonoperator  $H_{tr}$  des Unterraums der transversalen Freiheitsgrade. Wir weisen darauf hin, dass ein Hamiltonoperator strenggenommen ein linearer Operator zu sein hat. Im folgenden stellen wir uns aber auf den Standpunkt, dass der Term  $U_0|\psi|^2|\phi|^2$  als zusätzliches, effektives Potential interpretiert werden kann; darum verwenden wir in dieser Arbeit den Begriff *effektiver Hamiltonoperator*. Da  $\phi$  als eine transversale Eigenfunktion angenommen wurde, können wir schreiben

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V + U_0n(x,t)|\phi|^2\right]\phi = \epsilon(n(x,t))\phi. \quad (3.30)$$

Die zur Transversalmode  $\phi$  gehörende Eigenenergie  $\epsilon$  hängt wegen des Dichteterms  $n(x,t)$  in (3.30) parametrisch von  $x$  und  $t$  ab. Setzen wir das Ergebnis (3.30) in die Differentialgleichung (3.29) ein, so finden wir eine Wellengleichung für die longitudinale Wellenfunktion  $\psi$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \epsilon(n(x,t))\psi. \quad (3.31)$$

Dies ist eine effektiv eindimensionale Wellengleichung für die longitudinale Wellenfunktion  $\psi(x,t)$  deren nichtlinearer Term  $\epsilon(n(x,t))$  durch die Transversalgleichung (3.30) bestimmt wird. Der Term  $\epsilon(n(x,t))$  beinhaltet hier sowohl den Beitrag des externen Potentials  $V$ , als auch das effektive, durch die Nichtlinearität

induzierte Potential;  $\epsilon(n)$  kann im Allgemeinen numerisch aus der Transversalgleichung (3.30) bestimmt werden, in nur wenigen Spezialfällen kann ein analytischer Ausdruck dafür gefunden werden (vgl. Kap. 3.2.2):

Der Separationsansatz (3.25) ist nur für wenige Spezialfälle exakt: Ein trivialer Fall besteht darin, dass das Potential  $V$  unabhängig von  $x$  und  $U_0 = 0$  ist; dann gilt für den Kommutator

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, H_{tr} \right] = 0. \quad (3.32)$$

Für endliche Parameter  $U_0$  ist der Separationsansatz dann exakt, wenn  $V$  unabhängig von  $x$  ist und die longitudinale Dichte  $n = |\psi|^2$  konstant ist. Im adiabatischen Grenzfall ist obige Kommutatorrelation immer nur näherungsweise erfüllt, und es gilt (wenn zumindest das Fallenpotential  $V$  separabel ist) lediglich

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, H_{tr} \right] \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (U_0 |\psi|^2 |\phi|^2). \quad (3.33)$$

Der Term auf der rechten Seite in (3.33) geht gegen null, wenn die Dichte des Kondensats entlang des Wellenleiters nur schwach gekrümmt ist. Zur Herleitung der eindimensionalen Wellengleichung (3.31) war die Annahme, dass wir uns im adiabatischen Regime befinden essentiell, darum nennen wir (3.31) auch *adiabatische* oder *quasi-eindimensionale* Gross-Pitaevskii-Gleichung.

### 3.2.2 Radialsymmetrische harmonische Wellenleiter

Wir kommen nun zu den für Wellenleiter wichtigen Spezialfall eines radialsymmetrischen transversalen Einschlusses und betrachten Potentiale der Form

$$V(x, r) = V_{\parallel}(x) + V_{\perp}(x, r), \quad \text{mit } r = \sqrt{y^2 + z^2}. \quad (3.34)$$

Hierbei ist  $V_{\parallel}(x)$  eine longitudinale Potentialkomponente und  $V_{\perp}(x, r)$  eine radialsymmetrische transversale Komponente, welche ebenfalls explizit von  $x$  abhängen kann. In diesem Fall lautet der Separationsansatz  $\Psi(x, r) = \psi(x)\phi(r, n(x, t))$  und die Gleichungen (3.30), (3.31) nehmen die Form

$$\epsilon(n)\phi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_{\perp}(x, r) + U_0 n(x, t) |\phi|^2 \right] \phi, \quad (3.35)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\parallel}(x) + \epsilon(n(x, t)) \right] \psi \quad (3.36)$$

an. Im Folgenden betrachten wir den Fall eines sich im Grundzustand befindenden Kondensats, das heißt, wir setzen für  $\phi$  den Eigenzustand von (3.35), der zu einer minimalen Transversalenergie  $\epsilon(n)$  führt.



Im Kontext von magnetischen Wellenleiterstrukturen ist das radiale, harmonische Oszillatorpotential von besonderer Wichtigkeit,

$$V_{\perp}(x, r) = \frac{1}{2}m\omega^2(x)r^2. \quad (3.37)$$

Hierbei erlauben wir eine explizite Abhängigkeit der radialen Oszillatorfrequenz  $\omega$  vom Ort  $x$  längs der Longitudinalachse. Nehmen wir im Folgenden an, dass  $\phi$  der transversale Grundzustand sei, so können wir für das harmonische Potential (3.37) analytische Ausdrücke für  $\epsilon(n)$  in den Grenzfällen sehr kleiner und sehr großer Teilchenwechselwirkung herleiten.

Für den ersten Grenzfall, der durch  $a_s n \ll 1$  quantitativ definiert wird, können wir störungstheoretisch vorgehen: Wir betrachten zunächst die Transversalgleichung (3.36); Wir suchen eine störungstheoretische Korrektur zum transversalen Grundzustand bei  $U = 0$ ,

$$\phi_0(r) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} e^{-mr^2/(2\hbar)}. \quad (3.38)$$

Die transversale Grundzustandsenergie bei  $U_0 = 0$  ist  $\epsilon(n) = \hbar\omega$  [89]. In erster Ordnung Störungstheorie finden wir in Übereinstimmung mit [71]

$$\epsilon_{st}(n) = \hbar\omega + U_0 \langle \phi | |\phi|^2 | \phi \rangle = \hbar\omega + 2\pi U_0 n \int_0^{\infty} r |\phi_0(r)|^4 dr = \hbar\omega + 2\hbar\omega a_s n; \quad (3.39)$$

hier wurde  $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s / m$  verwendet.

Im Grenzfall hoher Teilchenzahldichten ( $a_s n \gg 1$ ) können wir mittels der *Thomas-Fermi Näherung* [59] einen analytischen Ausdruck für  $\epsilon(n)$  finden. Für hohe Teilchendichten vernachlässigen wir die kinetische Energie gegenüber der potentiellen Energie und der Wechselwirkungsenergie. Wir finden dann für den Grundzustand der Transversalgleichung (3.36) die Thomas-Fermi Wellenfunktion

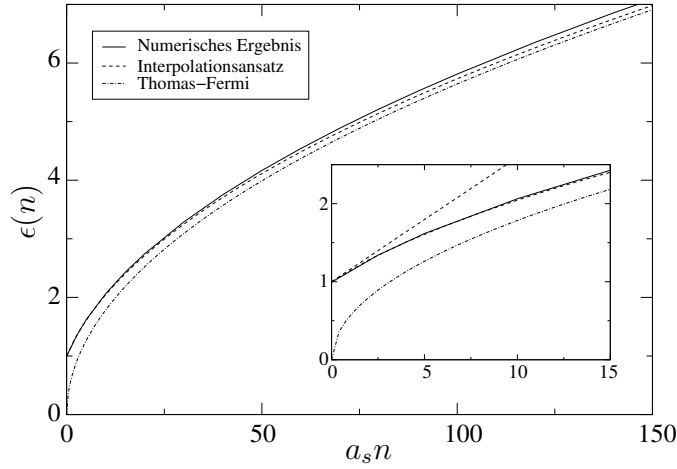
$$\phi_{TF} = \frac{1}{U_0 \sqrt{n}} \sqrt{\epsilon(n) - V_{\perp}(r)}. \quad (3.40)$$

Setzen wir dies in die Normierungsbedingung (3.26) für  $\phi$  ein, so ergibt sich nach kurzer Rechnung

$$\epsilon_{TF}(n) = 2\hbar\omega \sqrt{na_s}. \quad (3.41)$$

Wir leiten nun einen analytische Ausdruck her, der den Verlauf von  $\epsilon(n)$  zwischen den beiden betrachteten Grenzfällen geringer und hoher Teilchenzahldichte interpoliert. Dazu machen wir den Ansatz

$$\epsilon(n) = [\alpha + \beta(a_s n) + \gamma(a_s n)^2]^{1/4}. \quad (3.42)$$



**Abbildung 3.1:** Die Abbildung zeigt  $\epsilon$  (in Einheiten  $\hbar\omega$ ) als Funktion von  $a_s n$  (in Einheiten  $\hbar^2/m$ ). Die durchgezogene Linie wurde numerisch errechnet und stimmt für große Werte  $a_s n$  gut mit der Thomas-Fermi Näherung (3.41) überein; Die Interpolationsformel (3.45) approximiert die numerischen Ergebnisse besonders gut für kleine  $a_s n$  und nähert sich für große  $a_s n$  von oben der Thomas-Fermi Näherung an. Das eingesezte Bild vergrößert den Bereich bei kleinen Werten von  $a_s n$ . Wie erwartet, zeigt sich in diesem Regime eine starke Diskrepanz zwischen der Thomas-Fermi Näherung und der numerische Kurve; die Gerade stellt das störungstheoretisch berechnete Ergebnis (3.39) dar und approximiert die numerische Kurve nahe am Ursprung.

Im Grenzfall sehr kleiner Wechselwirkungen ( $a_s n$ ) finden wir durch lineare Approximation von (3.42)

$$\epsilon(n) = \alpha^{1/4} + \frac{1}{4}\alpha^{-3/4}\beta(a_s n), \quad \text{für } (a_s n) \ll 1. \quad (3.43)$$

Im Grenzfall ( $a_s n$ )  $\gg 1$  berücksichtigen wir nur den in  $a_s n$  quadratischen Term in (3.42) und finden

$$\epsilon(n) = \gamma^{1/4} \sqrt{a_s n}, \quad \text{für } (a_s n) \gg 1. \quad (3.44)$$

Durch Vergleich mit (3.39) und (3.41) bestimmen wir die Koeffizienten in (3.43) und (3.44) zu  $\alpha = \hbar^4 \omega^4$ ,  $\beta = 8\hbar^4 \omega^4$  und  $\gamma = 16\hbar^4 \omega^4$ . Damit ist gezeigt, dass der Ansatz (3.42) die Grenzfälle sehr kleiner und sehr großer Wechselwirkung reproduziert. Setzen wir die Koeffizient  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  in (3.42), so finden wir nach kurzer Umformung

$$\epsilon(n) = \sqrt{\hbar^2 \omega^2 + 4\hbar^2 \omega^2 (a_s n)}. \quad (3.45)$$

Dieses Ergebnis lässt sich überprüfen, indem man für einen vorgegebenen Wert von  $a_s n$  den Grundzustand  $\phi$  der Transversalgleichung (3.36) mittels Imaginärzeitpropagation (vgl. Abschnitt 6.5) numerisch ermittelt und daraus die Größe  $\epsilon(n)$  bestimmt. Abb.3.1 zeigt, dass die Interpolationsformel (3.45) die numerisch errechneten Werte von  $\epsilon(n)$  sehr gut approximiert und die Grenzfälle sehr kleiner und sehr großer Wechselwirkungsparametern  $a_s n$  korrekt wiedergibt.

### 3.3 Stationäre Lösungen

Wir untersuchen in diesem Abschnitt stationäre Lösungen der adiabatischen Wellengleichung (3.31). Dazu separieren wir in einem ersten Schritt die Zeit ab und setzen dazu den Ansatz

$$\psi(x, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \psi(x). \quad (3.46)$$

in (3.31) ein. Der Parameter  $\mu$  ist das konstante chemische Potential der Kondensatwellenfunktion. Damit finden wir die stationäre adiabatische Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\mu\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V_{\parallel}(x)\psi(x) + \epsilon(n(x))\psi(x). \quad (3.47)$$

(Die longitudinale Dichte ist damit natürlich auch zeitunabhängig). Mit Gleichung (3.47) können sowohl gebundene, als auch stromtragende Zustände in quasi-eindimensionalen Potentialstrukturen untersucht werden. Da wir im Weiteren vorwiegend an der Dichte  $n(x)$  dieser stromtragenden Moden interessiert sind, erweist es sich als vorteilhaft, in der Gross-Pitaevskii-Gleichung die Wellenfunktion durch ihre Amplitude und Phase auszudrücken.

#### 3.3.1 Bewegungsgleichung für die Amplitude

Die Wellengleichung (3.47) kann unter Verwendung der Darstellung

$$\psi(x) = A(x) e^{i S(x)} \quad (3.48)$$

in ein System von zwei Differentialgleichungen umgeschrieben werden; hierbei sind  $A(x)$  (Amplitude) und  $S(x)$  (Phase) reelle Funktionen und es gilt  $n = A^2$ . Setzen wir (3.48) in (3.47) ein so finden wir

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} [A'' + 2iA'S' + iAS'' + i^2 A(S')^2] + \epsilon(n)A. \quad (3.49)$$

Wir trennen (3.49) in Real- und Imaginärteil auf und finden damit die beiden Gleichungen

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} [A'' - A(S')^2] + V_{\parallel}(x)A + \epsilon(n)A, \quad (3.50)$$

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} [2A'S' + AS'']. \quad (3.51)$$

Wir führen nun den Teilchenstrom  $j$  ein:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\psi') - (\psi^*)' \psi]. \quad (3.52)$$

Mit (3.48) finden wir

$$j = \frac{\hbar}{m} n S'; \quad (3.53)$$

$j$  ist konstant, weil es gilt

$$\frac{d}{dx} \left( j \frac{m}{\hbar} \right) = \frac{d}{dx} (A^2 S') = A(2A' S' + A S'') \stackrel{(3.51)}{=} 0, \quad (3.54)$$

und die Gleichung (3.50) wird zu

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} A'' + \frac{m}{2} \frac{j^2}{n^2} A + V_{\parallel}(x) A + \epsilon(n) A. \quad (3.55)$$

Die Gleichungen (3.53), (3.55) sind äquivalent zu der adiabatischen Gross-Pitaevskii-Gleichung (3.31); sie erlauben es, die Wellenfunktionen stationärer Kondensatzustände in quasi-eindimensionalen Wellenleiterstrukturen bei vorgegebenem chemischen Potential  $\mu$  und Strom  $j$  zu finden. Dazu löst man in einem ersten Schritt die Bewegungsgleichung für die Amplitude (3.55) und bestimmt in einem zweiten Schritt durch einfache Integration der Gleichung (3.53) die Phase der Wellenfunktion.

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die Bewegungsgleichung (3.55) ein zeitunabhängiger Spezialfall der hydrodynamischen Darstellung der Gross-Pitaevskii-Gleichung ist. Diese hydrodynamische Darstellung lautet [51]

$$\frac{\partial}{\partial t} n = -\frac{\partial}{\partial x} (nv) \quad (3.56)$$

und

$$m \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\hbar^2 m}{2n^{1/2}} \frac{\partial^2 n^{1/2}}{\partial x^2} - \frac{mv^2}{2} - V(x) - gn \right]. \quad (3.57)$$

Dabei wurde über die Relation  $j = nv$  die Geschwindigkeit  $v$  des Kondensats eingeführt. Diese Darstellung wird sich als nützlich erweisen, wenn wir in Kapitel 5 den Transport durch Unordnungsregionen in Wellenleitern untersuchen werden.

### 3.3.2 Integration der Bewegungsgleichung

Im Folgenden integrieren wir die Bewegungsgleichung für die Amplitude (3.55) und zeigen, dass die daraus resultierende Gleichung als Bewegungsgleichung eines *fiktiven klassischen Teilchens* aufgefasst werden kann. Wir multiplizieren dazu (3.55) mit  $A'$  und integrieren nach  $x$

$$\mu \int_{x_0}^x dx A A' = \int_{x_0}^x d\tilde{x} A' \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} A'' + \frac{m}{2} \frac{j^2}{n^2} A + V_{\parallel}(\tilde{x}) A + \epsilon(n) A \right]. \quad (3.58)$$

Hierbei sei  $x_0$  ein Ort, an dem die Amplitude  $A$  der Wellenfunktion und deren Ableitung  $A'$  bekannt seien. Die Integration in (3.58) lässt sich für den Spezialfall  $V_{||}(x) = V_0 = \text{const}$  analytisch ausführen und wir finden

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(A')^2 + \frac{m j^2}{2A^2} + (\mu - V_0)A^2 - \mathcal{E}(n); \quad (3.59)$$

hierbei ist  $\mathcal{E}(n)$  die Stammfunktion von  $\epsilon(n)$ , also

$$\mathcal{E}(n) = \int_0^n \epsilon(\tilde{n}) d\tilde{n}. \quad (3.60)$$

Die Integrationskonstante  $E$  ist gegeben durch

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(A'(x_0))^2 + \frac{m j^2}{2A^2(x_0)} + (\mu - V_0)A^2(x_0) - \mathcal{E}(n(x_0)). \quad (3.61)$$

Führen wir nun die Funktion

$$W(n) = \frac{m j^2}{2n} + (\mu - V_0)n - \mathcal{E}(n) \quad (3.62)$$

ein, so können wir (3.59) folgendermaßen schreiben

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(A')^2 + W(A^2). \quad (3.63)$$

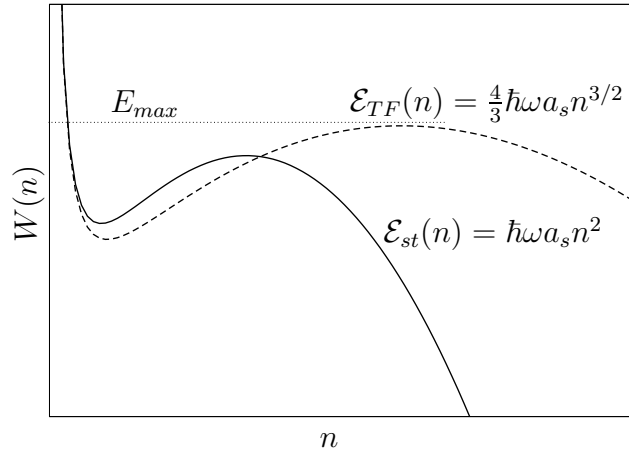
Gleichung (3.63) hat formal die selbe Struktur, die man auch bei der Untersuchung der Dynamik eindimensionaler Hamiltonscher Systeme findet. Sie drückt die Energieerhaltung für ein *fiktives klassisches Teilchen* aus, das sich in der eindimensionalen Potentiallandschaft  $W(n = A^2)$  bewegt und die klassische Energie  $E$  besitzt;  $A$  übernimmt hier die Bedeutung des Ortes,  $x$  stellt eine fiktive Zeit dar. Die Lösungen  $A(x)$  koinzidieren somit mit den *klassischen* Trajektorien, die man für ein Teilchen im Potential  $W(n)$  findet. Das chemische Potential  $\mu$  und der Teilchenstrom  $j$  bestimmen die Form des Potentials, während der Wert von  $E$  eine *Trajektorie*  $A(x)$  selektiert.

Betrachten wir nun wieder den wichtigen Fall radialsymmetrischer Wellenleiter, so können wir  $\mathcal{E}(n)$  mittels der Interpolationsformel (3.45)

$$\mathcal{E}(n) = \frac{-\sqrt{\hbar^2\omega^2} + \sqrt{\hbar^2\omega^2(1 + 4a_s n)} + 4\sqrt{\hbar^2\omega^2(1 + 4a_s n)}a_s n}{6a_s} \quad (3.64)$$

in sehr guter Näherung darstellen. Für den Grenzfall  $a_s n \ll 1$  ergibt sich hieraus, bzw. durch direkte Integration von (3.39),

$$\mathcal{E}_{st}(n) = \hbar\omega n + \hbar\omega a_s n^2. \quad (3.65)$$



**Abbildung 3.2:** Die Abbildung zeigt einen typischen Verlauf des klassischen Potentials  $W(n)$  in den Grenzfällen schwacher (durchgezogene Linie) und starker (gestrichelte Linie) Atom-Atom Wechselwirkung.

Für das Thomas-Fermi Regime ergibt sich

$$\mathcal{E}_{TF}(n) = \frac{4}{3} \hbar \omega a_s n^{3/2}. \quad (3.66)$$

Typische Verläufe für das effektive Potential  $W(n)$  in diesen zwei Grenzfällen sind in Abb.3.2 dargestellt (hier wurde  $V_0 = 0$  gewählt). Wir stellen fest, dass  $W(n)$  immer ein lokales Maximum aufweist; wir bezeichnen die zugehörige Energie als  $E_{max}$ . Das fiktive klassische Teilchen führt eine gebundene Bewegung im lokalen Potentialminimum aus, solange seine klassische Energie  $E$  kleiner als die Grenzenenergie  $E_{max}$  gewählt wird. Ist  $E > E_g$ , so kann das Teilchen das lokale Minimum verlassen, was zur Folge hat, dass die Dichte  $n$  gegen  $n \rightarrow \infty$  divergiert. Eine ausführlichere Diskussion der Form von  $W(n)$  geben wir in Kapitel 3.3.3.

Wie oben erwähnt, ist die Bewegungsgleichung (3.55) nur dann geschlossen integrierbar, wenn  $V_{||}(x) = V_0 = \text{const}$  gewählt wird. Ist das externe Potential  $V_{||}$  nicht konstant, so entspricht das im Bilde des fiktivem klassischen Teilchens einem extern getriebenen System; die klassische Energie  $E$  ist in diesem Falle nicht mehr konstant. Wir zeigen im Folgenden, wie wir für ein beliebiges externes Potential  $V_{||}(x)$  ein Hamiltonsches System von Differentialgleichungen ableiten können, das zu (3.55) äquivalent ist. Wir bleiben im Bild des fiktiven klassischen Teilchens und betrachten die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(A, A') = \frac{\hbar^2}{2m} (A')^2 - \frac{m j^2}{2A^2} - [\mu - V_{||}(x)] A^2 + \mathcal{E}(A^2). \quad (3.67)$$

Wir führen den generalisierten Impuls

$$p \equiv \frac{\partial \mathcal{L}(A, A')}{\partial A'} = \frac{\hbar^2}{m} A' \quad (3.68)$$

ein und finden mittels der Legendretransformation  $\mathcal{H}(A, p) = A'p - \mathcal{L}(A, A')$  das Ergebnis

$$\mathcal{H}(A, p) = \frac{\hbar^2}{2m} p^2 + \frac{mj^2}{2A^2} + [\mu - V_{\parallel}(x)]A^2 - \mathcal{E}(A^2). \quad (3.69)$$

Damit können wir die beiden Hamiltonschen Bewegungsgleichungen aufstellen,

$$\begin{aligned} A' &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{m}{\hbar^2} p, \\ p' &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial A} = \frac{mj^2}{A^4} A - 2[\mu - V_{\parallel}(x)] A + 2\epsilon(n) A. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Eliminieren wir nun  $p$  durch Einsetzen der Ableitung der ersten Gleichung in die zweite Bewegungsgleichung, so finden wir damit mühelos die Bewegungsgleichung (3.55) für die Amplitude wieder. Die Hamiltonschen Gleichungen (3.70) stellen einen geeigneten Ausgangspunkt zur numerischen Integration der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung dar und erlauben es somit, für beliebige Potentiale  $V_{\parallel}(x)$ , bei gegebenen Werten für  $g, j, \mu, A(x_0)$  und  $A'(x_0)$ , die zugehörige stationäre Wellenfunktion des Kondensats im quasi-eindimensionalen Wellenleiter zu berechnen.

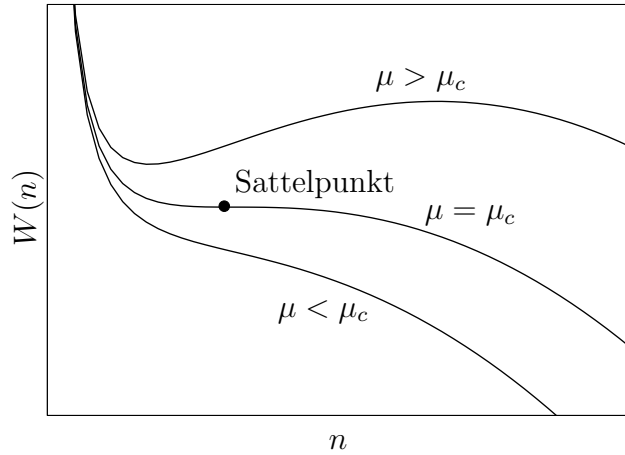
### 3.3.3 Stationäre Lösungen im uniformen Wellenleiter

In diesem Kapitel diskutieren wir die stationären stromtragenden Lösungen ( $j > 0$ ) der adiabatischen Gross-Pitaevskii Gleichung, wenn das externe Potential  $V_{\parallel}$  und die radiale Einschlussfrequenz  $\omega$  konstant sind. Wie konzentrieren uns dabei auf den Fall kleiner Kondensatdichten, d.h. im Folgenden ist  $\epsilon(n) = \hbar\omega + 2\hbar a_s \omega n$ . Da der Verlauf des klassischen Potentials  $W(n)$  auch im Regime hoher Dichten die gleichen qualitativen Eigenschaften, wie im Regime kleiner Dichten aufweist, sind die qualitativen Resultate der folgenden Diskussion auch für hohe Dichten gültig. Im Folgenden verwenden wir die abkürzende Schreibweise

$$g \equiv 2\hbar a_s \omega \quad (3.71)$$

und setzen o.B.d.A.  $V_0 = 0$ ; des Weiteren stellen wir fest, dass der Term  $\hbar\omega$  in  $\epsilon(n) = \hbar\omega + gn$  lediglich einen an allen Orten  $x$  konstanten Beitrag liefert und wir damit ein effektives chemisches Potential  $\tilde{\mu} \equiv \mu + \hbar\omega$  einführen können, das wir im Folgenden wieder mit dem Symbol  $\mu$  bezeichnen wollen.

Wir diskutieren in diesem Abschnitt die verschiedenen stationären Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung im Bilde der klassischen Dynamik des fiktiven Teilchens, das sich im Potential  $W(n)$  bewegt und werden die relevanten Trajektorien



**Abbildung 3.3:** Verschiedene Realisierungen des klassischen Potentials  $W(n)$ . Je nach Wahl der Parameter  $[\mu, g, j]$  hat  $W(n)$  ein lokales Minimum ( $\mu > \mu_c$ ), einen Sattelpunkt ( $\mu = \mu_c$ ), oder ist streng monoton fallend ( $\mu < \mu_c$ ).

für das Teilchen klassifizieren. Es wird sich zeigen, dass wir bei unserer Diskussion zwischen *gebundenen* und *ungebundenen* Trajektorien zu unterscheiden haben. Die Funktion  $W(n)$  hat folgende Grenzwerteigenschaften: Offensichtlich gilt  $W(n) \rightarrow \infty$  für alle Werte von  $g$  im Grenzfall  $n \rightarrow 0$ . Des Weiteren finden wir  $W(n) \rightarrow \infty$  für  $n \rightarrow \infty$ , wenn  $g < 0$  ist und  $W(n) \rightarrow -\infty$  für  $n \rightarrow \infty$ , wenn  $g > 0$  ist. Daraus können wir schließen, dass für attraktive Wechselwirkung ( $g < 0$ ), die Bewegung des fiktiven klassischen Teilchens im Potential  $W(n)$  immer gebunden ist. Das heißt, die Dichte  $n(x)$  des Kondensats bleibt immer endlich.

Der Fall repulsiver Wechselwirkung ( $g > 0$ ) weist ein komplexeres Verhalten auf: Abb.3.3 zeigt drei qualitativ unterschiedliche Realisierungen von  $W(n)$  bei verschiedenen Parametersätzen  $[\mu, g, j]$ . Je nach Wahl dieser Parameter hat  $W(n)$  ein lokales Minimum, einen Sattelpunkt, oder ist streng monoton fallend. Wir finden den geeigneten Parametersatz, der zur Sattelpunktskonfiguration führt, indem wir das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}W(n) &= -\frac{m j^2}{2n^2} + \mu - gn = 0, \\ \frac{d^2}{dx^2}W(n) &= -\frac{m j^2}{n^3} - g = 0 \end{aligned} \quad (3.72)$$

lösen. Nach kurzer Rechnung finden wir

$$8\mu^3 = 27mj^2g^2. \quad (3.73)$$

Dies ist das Kriterium, das  $[\mu, g, j]$  erfüllen müssen, damit  $W(n)$  einen Sattelpunkt aufweist. Die Relation (3.73) gibt Anlass zur Definition eines *kritischen*



Wertes  $\mu_c$  für das chemische Potential,

$$\mu_c = \left( \frac{27mj^2g^2}{8} \right)^{1/3}. \quad (3.74)$$

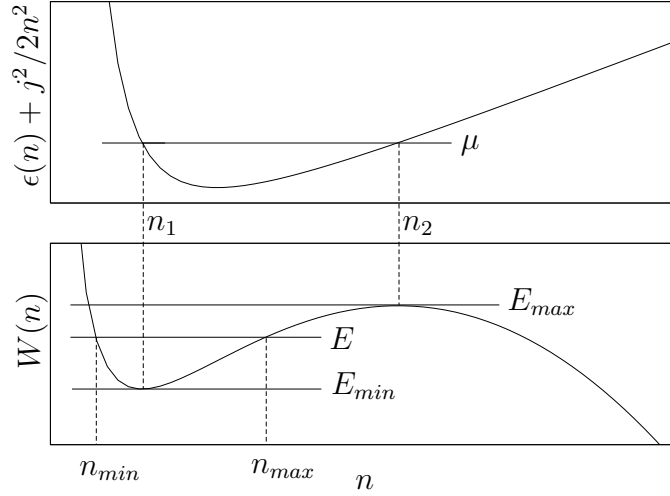
$W(n)$  hat dann folgende Eigenschaften (vgl. Abb.3.3):

- $\mu = \mu_c$  :  $W(n)$  hat einen Sattelpunkt,
- $\mu > \mu_c$  :  $W(n)$  hat ein lokales Minimum und Maximum,
- $\mu < \mu_c$  :  $W(n)$  ist streng monoton fallend.

Die verschiedenen Lösungstypen für  $A(x)$  sind nun durch die Trajektorien des fiktiven klassischen Teilchens bei verschiedenen klassischen Energien  $E$  (vgl. (3.61)) gegeben. Da es sich bei dem klassischen Analogon um ein eindimensionales System handelt, ist jede Trajektorie (und somit die Kondensatdichte) eindeutig durch die Potentialparameter  $[\mu, g, j]$  und die klassische Energie  $E$  bestimmt. Im Falle  $\mu < \mu_c$  sind für jeden beliebigen Wert von  $E$  nur ungebundene Trajektorien möglich, das heißt, die Dichte  $n$  und somit auch die Amplitude  $A$  weisen ein divergentes Verhalten auf. Diese divergenten Lösungen erfüllen zwar formal die Gross-Pitaevskii Gleichung, stellen aber keine physikalisch sinnvollen Lösungen dar, weil sie eine Akkumulation von Kondensat mit unendlich hoher Teilchendichte implizieren würden.

Das fiktive Teilchen kann eine gebundene Bewegung im klassischen Potential  $W(n)$  ausführen, wenn das notwendige und hinreichende Kriterium  $\mu > \mu_c$  erfüllt ist. In diesem Falle gibt es einen Bereich klassischer Energien  $E$ , die eine gebundene Bewegung des Teilchens im lokalen Minimum des Potentials  $W(n)$  erlauben. Wir bezeichnen die Energie eines im Minimum ruhenden Teilchens als  $E_{min} \equiv W(n_1)$ ; hierbei gibt  $n_1$  die Position des Minimums an (vgl. Abb.3.4). Offensichtlich handelt es sich hier um eine stabile Gleichgewichtslage (elliptischer Fixpunkt im klassischen Phasenraum) und die Dichte des Kondensates ist  $n_1 = \text{const.}$  Eine weitere Gleichgewichtslage mit uniformer Kondensatdichte existiert bei dem lokalen Maximum von  $W(n)$  an der Position  $n_2$  (wobei  $n_2 > n_1$  gilt), und wir definieren  $E_{max} \equiv W(n_2)$ . Wie wir in Abb.3.4 leicht erkennen handelt es sich dabei um eine, vom Standpunkt der klassischen Dynamik aus gesehen, instabile Gleichgewichtslage (hyperbolischer Fixpunkt im klassischen Phasenraum). Die klassische Bewegung des Teilchens verläuft somit auf gebundenen Trajektorien, wenn  $E_{min} \leq E \leq E_{max}$  gilt. Die Trajektorie bei  $E = E_{max}$  entspricht der Separatrix zwischen den Phasenraumteilen mit gebundenen und ungebundenen Trajektorien.

Die Lösungen in diesem Energiebereich, die alle den gleichen Teilchenstrom  $j$  tragen und alle zum gleichen chemischen Potential  $\mu$  gehören, sollen nun weiter untersucht werden. Betrachten wir zunächst die beiden uniformen Lösungen  $n_1$



**Abbildung 3.4:** Die Abbildung zeigt eine schematische Darstellung der Funktion  $\epsilon(n) + mj^2/2n^2$  (oben) und des klassischen Potentials  $W(n)$  (unten) für den Fall  $\mu > \mu_c$ . Das fiktive klassische Teilchen führt eine gebundene Bewegung aus, wenn für seine klassische Energie  $E_{min} \leq E \leq E_{max}$  gilt. Dies entspricht einer entlang des Wellenleiters zwischen den Extremalwerten  $n_{min}$  und  $n_{max}$  oszillierenden Kondensatdichte  $n(x)$ . Die uniformen Dichten  $n_i$  ( $i = 1, 2$ ), die im Bilde der klassischen Dynamik dem stabilen bzw. instabilen Fixpunkt im Phasenraum entsprechen, sind über die Bedingung  $\mu = \epsilon(n) + mj^2/2n^2$  definiert, und sind zugleich Nullstellen von  $dW/dn$ .

und  $n_2$ . Sie sind bestimmt durch die Gleichung

$$\frac{d}{dn}W(n) = -\frac{mj^2}{2n^2} - gn = 0. \quad (3.75)$$

Diese kubische Gleichung kann mittels der Formel von *Cardano* gelöst werden; es gibt drei Lösungen, von denen lediglich diejenigen mit positiver Dichte  $n > 0$  von Relevanz sind

$$n_{1,2} = \frac{1}{12gQ^{1/3}} \left[ \mp Q^{2/3} \mp 4\mu^2 \pm 4\mu Q^{1/3} + i\sqrt{3}Q^{2/3} - 4i\sqrt{3}\mu^2 \right],$$

mit  $Q \equiv -54mj^2g^2 + 8\mu^3 + 6\sqrt{3}j\sqrt{m(27mj^2g^2 - 8\mu^3)}g$ . (3.76)

Für  $\mu > \mu_c$  sind diese beiden Lösungen reell. Setzen wir die zugehörigen Amplituden  $A_{1,2} = \sqrt{n_{1,2}}$  in die Bewegungsgleichung (3.55) ein, so finden wir

$$\mu = \frac{mj^2}{2n_{1,2}^2} + gn_{1,2}. \quad (3.77)$$

Dies ist aber genau die Dispersionsrelation, die man für eine freie ebene Welle aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung erhält; setzt man nämlich  $\psi(x, t) = \sqrt{n} \exp(ikx)$  in die eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung (3.47) ein, so findet man

$$\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn. \quad (3.78)$$

Mit der Definition des Teilchenstroms  $j = \hbar n k / m$ , der mit einer ebenen Welle assoziiert ist (vgl. (3.53)) ergibt (3.78) wieder die Relation (3.77). Die Dispersionsrelation findet man auch dann wieder, wenn man mittels

$$\frac{d}{dn} W(n) = 0 \quad (3.79)$$

die Position des lokalen Minimums bzw. Maximums bestimmt. Dies wird durch Abb.3.4 illustriert: Die untere Tafel zeigt  $W(n)$  für einen gegebenen Parametersatz  $[j, g, \mu]$ , die obere die Dispersionrelation, die man für eine ebene Welle aus der Gross-Pitaevskii-Gleichung erhält. Das lokale Maximum und Minimum koinzidieren genau mit den Stellen, wo die rechte Seite von (3.77) genau den Wert  $\mu$  annimmt, der den Verlauf des Potentials  $W(n)$  bestimmt. Die beiden Terme in der Relation (3.77), die addiert das chemische Potential ergeben, können als kinetische und als Wechselwirkungsenergie des uniformen Teilchenstroms identifiziert werden

$$E_{kin} = \frac{m j^2}{2 n^2}, \quad E_{WW} = g n. \quad (3.80)$$

Die beiden uniformen Lösungen mit Dichte  $n_1$  und  $n_2$  unterscheiden sich darin, dass für  $n_1$  typischerweise die kinetische Energie der kondensierten Teilchen überwiegt, wohingegen bei  $n_2$  die Wechselwirkungsenergie dominiert. Für jede der beiden Lösungen lässt sich die Geschwindigkeit  $v$  des kohärenten Kondensatflusses angeben.

$$v_i = j n_i^{-1} \quad i = 1, 2. \quad (3.81)$$

Wegen  $n_1 < n_2$  gilt  $v_1 > v_2$ . Wir wollen die Geschwindigkeiten  $v_i$  mit der Schallgeschwindigkeit im Kondensat in Relation setzen. Für ein ruhendes Kondensat mit konstanter Dichte  $n$  ist die Schallgeschwindigkeit als

$$c^2(n) = n \frac{d\mathcal{E}}{dn} \quad (3.82)$$

definiert (dies folgt aus den Bogoliubov-Gleichungen [3, 71]). Für ein bewegtes Kondensat mit konstanter Dichte können die Geschwindigkeiten  $v_i$  aus der Dispersionsrelation

$$\mu = \frac{1}{2} m v_i^2 + \epsilon(n_i) \quad (3.83)$$

bestimmt werden. Zudem folgt aus (3.81, 3.82) der Zusammenhang

$$\frac{d^2 W}{dn^2} = \frac{1}{n} [v^2 - c^2(n)]. \quad (3.84)$$

Da  $d^2 W / dn^2$  bei  $n_1$  ( $n_2$ ) positiv (negativ) (vgl. Abb.3.4) ist folgt aus (3.84)  $v_1 > c(n_1)$  ( $v_2 < c(n_2)$ ). Wir halten somit fest, dass die Schallgeschwindigkeit

in der Lösung mit Dichte  $n_1$  kleiner als die Teilchengeschwindigkeit ist (*Überschalllösung*), während bei der Lösung mit Dichte  $n_2$  die Schallgeschwindigkeit größer als die Geschwindigkeit der Teilchen ist. Eine ausführlichere Diskussion dieses Sachverhaltes findet sich in [71].

Nun betrachten wir die gebundenen oszillierenden Lösungen im klassischen Energiebereich  $E_{min} \leq E \leq E_{max}$ . Die Bewegungsgleichung (3.63) lässt sich durch Separation der Variablen lösen; dazu schreiben wir zunächst,

$$A' = \pm \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E - \frac{mj^2}{2A^2} - \mu A^2 + \frac{1}{2}gA^4}; \quad (3.85)$$

dies lautet in integraler Form

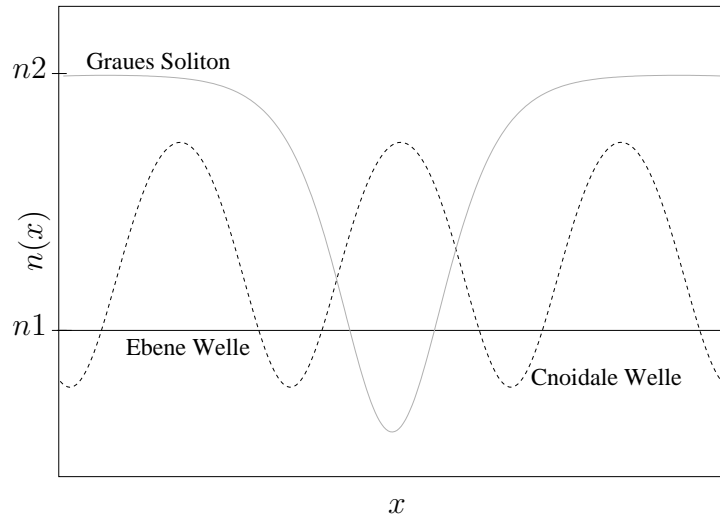
$$\pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \int_{A_0}^{A(x)} \frac{dA}{\sqrt{E - \frac{mj^2}{2A^2} - \mu A^2 + \frac{1}{2}gA^4}} = \int_{x_0}^x d\tilde{x} = (x - x_0). \quad (3.86)$$

Die linke Seite von (3.86) stellt ein elliptisches Integral dar und die Dichte  $n(x) = (A(x))^2$  kann mittels Jacobi-elliptischer Funktionen dargestellt werden [90]. Wir verzichten hier auf eine formale Behandlung des Integrals (3.86), da wir uns im Rahmen dieser Arbeit im Allgemeinen nicht mit uniformen Wellenleitern beschäftigen, und verweisen dazu auf [91, 92]; wir wollen hier lediglich einen qualitativen Überblick in Anlehnung an [71] über die stationären Moden geben. Zunächst stellen wir fest, dass die Dichteoszillationen periodisch sind, da die äquivalente Dynamik des fiktiven klassischen Teilchen in einem zweidimensionalen Phasenraum nur periodische gebundene Bahnen zulässt. Betrachten wir nun Trajektorien mit Energien  $E$  die nahe bei  $E_{min}$  liegen ( $E \gtrsim E_{min}$ ), so lässt sich das Potential  $W(n)$  in der Umgebung von  $n_1$  harmonisch approximieren, und die Dichteoszillationen können näherungsweise durch sinusförmige Wellen beschrieben werden (vgl. Abschnitt 4.2.3)

$$n(x) = n_1 + \delta n_1 + \sqrt{2n_1 \delta n_1 + (\delta n_1)^2} \cos(\kappa x). \quad (3.87)$$

Erhöht man die klassische Energie  $E$ , so nimmt die Auslenkungsamplitude der Oszillationen, wie man sehr anschaulich anhand von Abb.3.4 erkennen kann, zu. Die Lösungen nennt man *cnoide* Wellen mit periodischen Oszillationen zwischen den beiden Werten  $n_{min}$  und  $n_{max}$ . Im Grenzfall  $E \rightarrow E_{max}$  (mit  $E < E_{max}$ ) koexistiert die uniforme Lösung  $n(x) = n_2$  mit einer Solitonlösung, die im klassischen Analogon einer Bewegung entlang der Separatrix  $E = E_{max}$  entspricht. Es handelt sich dabei um ein stehendes *graues Soliton* [3],

$$n_s(x) = n_2 \left[ \tanh \left( \frac{x - x_m}{\sqrt{2} \xi} \right) \right]^2, \quad \text{mit } \xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mgn_2}}, \quad (3.88)$$



**Abbildung 3.5:** Die Abbildung zeigt charakteristische Konfigurationen von Kondensatdichten in einem uniformen Wellenleiter. Die konstante Dichte (schwarze Linie) repräsentiert den Fall einer ebenen Welle, die gestrichelte Linie stellt cnoidale Dichteooszillation dar und die graue Linie zeigt den Grenzfall eines grauen Solitons.

mit konstanter Dichte  $n(x) \rightarrow n_2$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  und einem Dichteminimum bei  $x = x_m$ , wo die minimale Dichte  $n_{min}$  die Bedingung  $W(n_{min}) = W(n_2)$  erfüllt (vgl. Abb.3.4). Einen schematischen Überblick über die oben diskutierten Lösungen gibt Abb.3.5: Die Abbildung zeigt die konstante Dichte  $n_1$  bei  $E = E_{min}$ , eine cnoidale Dichteooszillation für eine klassische Energie  $E_{min} < E < E_{max}$  und den Grenzfall des grauen Solitons für  $E \rightarrow E_{max}$ .

Diese hier diskutierten Eigenmoden werden im Kontext von Streuproblemen, wie sie im nächsten Kapitel betrachtet werden sollen, von Bedeutung sein, um asymptotische Streuzustände definieren zu können.

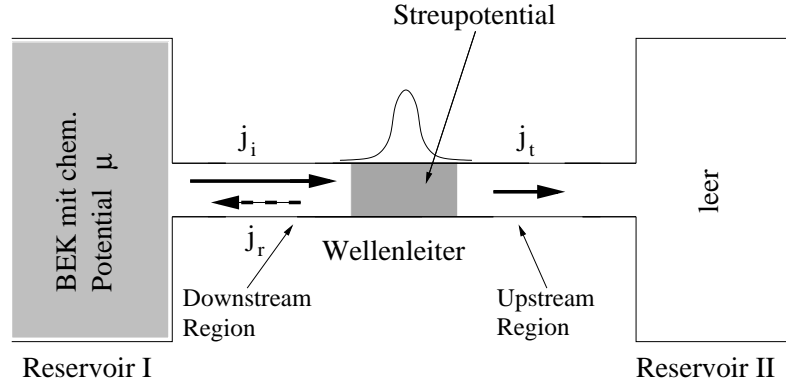
# Kapitel 4

## Transportphysik mit Bose-Einstein-Kondensaten

In diesem Kapitel entwickeln wir verschiedene Ansätze, um den Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch Materiewellenleitergeometrien zu untersuchen. Wir zeigen zunächst eine Methode auf, die es erlaubt, für eine gegebene Wellenleitergeometrie alle stationären Zustände, das heißt, alle Lösungen der zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung zu finden. Des Weiteren zeigen wir, wie sich Transmissions- und Reflexionskoeffizienten für dieses nichtlineare Transportproblem definieren lassen. Im zweiten Teil dieses Kapitels entwickeln wir ein Verfahren, mit dem wir in der Lage sind, auch zeitabhängige Transportprozesse zu simulieren. Damit kann unter anderem untersucht werden, ob eine stationäre Lösung der zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung dynamisch stabil ist, in einem realistischen Transportprozess auch tatsächlich besetzt wird und somit zum Transport von Kondensat beiträgt.

### 4.1 Grundlegendes zu Transportprozessen

In diesem Abschnitt führen wir in die grundlegenden Fragestellungen ein, die uns im Kontext von Transportprozessen im weiteren Verlauf dieser Arbeit interessieren werden. Wir beginnen mit einem einfachen Gedankenexperiment. Dazu betrachten wir, wie in Abb.4.1 gezeigt, zwei Reservoirs, die durch einen Wellenleiter, miteinander verbunden sind. Unter einem Reservoir verstehen wir eine Fallenstruktur, in der eine makroskopische Menge an Bose-Einstein-Kondensat in ihrem energetischem Grundzustand gespeichert wird; somit kann diesem Kondensat eindeutig ein chemisches Potential  $\mu$  zugeordnet werden. Wir nehmen nun an, dass an dieses gefüllte Reservoir (in Abb.4.1 ist dies das Reservoir I) ein quasi-eindimensionaler Wellenleiter angekoppelt wird, derart dass vom Reservoir



**Abbildung 4.1:** Ein mit Bose-Einstein-Kondensat gefülltes und ein leeres Reservoir sind durch einen Wellenleiter, der ein lokales Streupotential besitzt, verbunden. Aus dem Reservoir I werde eine ebene Welle, die den Strom  $j_i$  trägt, ausgekoppelt und in den Wellenleiter injiziert. Am Streupotential kommt es zu einer partiellen Rückreflexion der Materiewelle, so dass ein Strom  $j_r$  reflektiert und ein Strom  $j_t$  transmittiert wird. Da das Reservoir II leer sei, fließt kein Strom von rechts zum Streupotential hin.

eine monochromatische Welle

$$\psi(x) = Ae^{ikx}, \text{ mit Wellenvektor } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mu} \quad (4.1)$$

ausgekoppelt werden kann, die in den Wellenleiter injiziert wird. Des Weiteren nehmen wir an, dass die Uniformität des Wellenleiters in einem endlichen Raumbereich aufgehoben wird. Konkret bedeutet dies, dass der Wellenleiter zum Beispiel eine Engstelle aufweist, die als Potentialstruktur wirkt, an der die Materiewelle gestreut wird, was dazu führt, dass das im Wellenleiter nach rechts propagierende Kondensat am Streupotential partiell reflektiert wird. Der transmittierte Anteil erreicht nach weiterer Propagation das als leer angenommene Reservoir II. Wir bezeichnen im Weiteren den uniformen Teil des Wellenleiters links des Streupotentials als *Upstream-Region* und den Teil rechts davon als *Downstream-Region*. In idealisierender Weise nehmen wir an, dass die Reservoire so groß sind, dass die aus Reservoir I ausgekoppelte kleine Kondensatmenge während des gesamten betrachteten Transportprozesse das chemische Potential  $\mu$  im Reservoir I unverändert läßt, und zudem aus Reservoir II keine Rückreflexion in den Wellenleiter stattfindet.

Unser Ziel besteht nun darin, den Transport von Bose-Einstein-Kondensat vom vollen zum leeren Reservoir qualitativ und quantitativ zu erfassen. Insbesondere wollen wir der Fragestellung nachgehen, ob und unter welchen Umständen stationärer Transport möglich ist, oder ob Transportprozesse von miteinander wechselwirkenden, kondensierten Bosonen eine unvermeidliche zeitliche Dynamik aufweisen.

In einer Vorüberlegung betrachten wir zunächst den konzeptionell einfachen Fall

von miteinander nicht-wechselwirkenden Bosonen; die Kondensatwellenfunktion wird dann durch die lineare Schrödingergleichung beschrieben. Aus elementaren quantenmechanischen Überlegungen ist hinreichend bekannt, dass es dann eine stationäre Lösung der Schrödingergleichung entlang des quasi-eindimensionalen Wellenleiters gibt, die den Randbedingungen

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{ikx} + re^{-ikx} & \text{in der Upstream Region} \\ te^{ikx} & \text{in der Downstream Region} \end{cases} \quad (4.2)$$

genüge tut ( $a, t, r$  sind komplexe Koeffizienten). Die Struktur der Wellenfunktion in der Up- und Downstreamregion erlaubt, die Definition von einfallendem Teilchenstrom ( $j_i = |a|^2 \hbar k / m$ ), reflektiertem ( $j_r = |r|^2 \hbar k / m$ ) und transmittiertem Strom ( $j_t = |t|^2 \hbar k / m$ ). Für diese Ströme gilt aufgrund der Teilchenzahlerhaltung  $j_i = j_r + j_t$ ; effektiv fließt damit der Strom  $j_t$  von links nach rechts.

Bei der Konstruktion solch eines stationären Zustandes verwendet man das Superpositionsprinzip, das für die lineare Schrödingergleichung gültig ist. Wenn wir uns nun dem Transport von Bose-Einstein-Kondensaten zuwenden, so sehen wir uns zum einen mit der Schwierigkeit konfrontiert, dass für die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung das Superpositionsprinzip nicht mehr gilt, und somit die Unterscheidung zwischen einfallenden und reflektierten Materiewellenkomponenten scheinbar unmöglich wird. Zum anderen können wir nicht a priori, in Analogie zur linearen Quantenmechanik, davon ausgehen, dass es stationäre Transportmoden gibt und des Weiteren wissen wir ebenfalls nicht, ob diese - wenn sie existieren - dynamisch stabil sind.

In diesem Kapitel wollen wir Methoden aufzeigen, die es erlauben, diesen grundlegenden konzeptionellen Schwierigkeiten zu begegnen. Dazu untersuchen wir zunächst, welche Bedingungen für die Existenz stationärer Transportmoden erfüllt sein müssen, zeigen Wege zur Definition von Transmissions und Reflexionskoeffizienten auf und führen eine Methode ein, die es erlaubt, ein realistisches Transportexperiment zu simulieren und die dynamische Stabilität von stationären Transportzuständen zu untersuchen. Wir bewegen uns ab jetzt immer im Regime, in welchem die Nichtlinearität die Form  $\epsilon(n) = \hbar\omega + gn$  hat.

## 4.2 Stationäre Transportmoden

Im Folgenden werden wir Transportmoden der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung in Wellenleitern betrachten. Am Beispiel eines stationären Stromflusses durch einen uniformen Wellenleiter werden wir erkennen, dass die repulsive Teilchenwechselwirkung zu einer Limitierung der Transportfähigkeit des Wellenleiters führt. Des Weiteren werden wir Transportprozesse als Streuprozesse umformulieren und geeignete stromtragende stationäre Streuzustände im Wellenleiter mit



Potentialbarrieren identifizieren. Zudem werden zwei Verfahren aufgezeigt, die es erlauben, den nichtlinearen Streuzuständen Transmissions- und Reflexionskoeffizienten zuzuordnen.

### 4.2.1 Homogener Transport durch Wellenleiter

In diesem Abschnitt untersuchen wir einen einfachen Fall von stationärem Transport durch einen uniformen Wellenleiter ohne weiteres Streupotential, um aufzuzeigen, dass die Nichtlinearität in der Gross-Pitaevskii-Gleichung zu einer wichtigen Modifikation des Transports durch einen solchen Wellenleiters führt.

Wir betrachten einen quasi-eindimensionalen Wellenleiter mit radialsymmetrischem, harmonischem Einschluss

$$V_{\perp}(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (4.3)$$

und nehmen an, dass sich das Kondensat im transversalen Grundzustand befinde. Wenn wir uns auf den Fall kleiner Kondensatdichten beschränken (vgl. (3.39)), so lautet die zugehörige eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hbar\omega + g|\psi|^2 \right] \psi = \mu\psi. \quad (4.4)$$

Der einfachste Fall von stationärem Transport wird durch eine vom linken zum rechten Reservoir laufende ebene Welle

$$\psi(x) = \sqrt{n} e^{ikx} \quad \text{mit } n = \text{const} \quad (4.5)$$

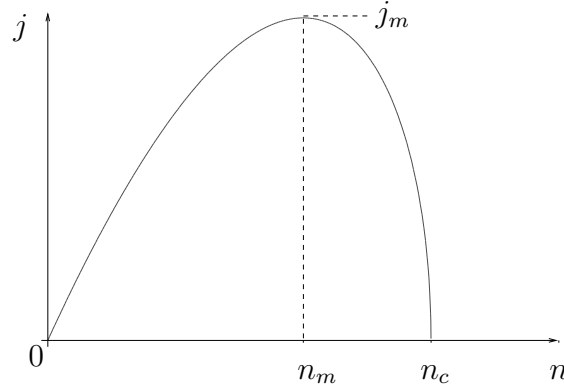
dargestellt. Es wird also ein räumlich und zeitlich homogener Dichtefluss durch den Wellenleiter transportiert. Setzen wir dies in (4.4) ein, so erhalten wir wieder die wohlbekannte Dispersionsrelation

$$\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega + gn. \quad (4.6)$$

Der mit der ebenen Welle assoziierte Strom lautet unter Verwendung von (4.6)

$$j = n \frac{\hbar k}{m} = n \sqrt{\frac{2}{m}(\mu - \hbar\omega - gn)}. \quad (4.7)$$

Aus (4.7) ist leicht ersichtlich, dass im Falle verschwindender Atom-Atom Wechselwirkung ( $g = 0$ ), der Strom  $j$  linear mit der Dichte  $n$  anwächst. Liegt eine repulsive Wechselwirkung vor ( $g > 0$ ), so zeigt sich ein komplexeres Verhalten: Abb.4.2 zeigt den Verlauf des durch den Wellenleiter transportierten Stromes  $j$



**Abbildung 4.2:** Teilchenstrom  $j$ , der von einer ebenen Welle durch den Wellenleiter getragen werden kann. Der Strom  $j$  hängt nichtlinear von der Teilchendichte  $n$  ab, und es existiert eine Dichte  $n_m$ , für die der Wert von  $j$  maximal wird. Jenseits einer kritischen Dichte  $n_c$  ist kein Stromfluss mehr möglich.

als Funktion der Dichte  $n$ . Es zeigt sich, dass es eine kritische Dichte  $n_c$  gibt, oberhalb der, bei vorgegebenem  $\mu$  und  $g$ , kein Stromfluss mehr möglich ist. Aus (4.7) sehen wir, dass

$$n_c = \frac{\mu - \hbar\omega}{g} \quad (4.8)$$

gilt. Physikalisch bedeutet dies, dass die Summe aus Wechselwirkungsenergie  $gn$  und transversaler Nullpunktsenergie  $\hbar\omega$  genauso groß, wie das chemische Potential  $\mu$  wird. Des Weiteren stellen wir fest, dass es eine Dichte  $n_m$  gibt, die einen maximalen Stromfluss zulässt; durch eine elementare Rechnung finden wir

$$n_m = \frac{2}{3} \frac{\mu - \hbar\omega}{g}. \quad (4.9)$$

Der zugehörige maximale Strom  $j_m$  nimmt die Form

$$j_m = \frac{2}{9} \frac{\sqrt{6}}{g} (\mu - \hbar\omega) \sqrt{\frac{\mu - \hbar\omega}{m}} \quad (4.10)$$

an. Dieses einfache Beispiel zeigt deutlich auf, dass bei Transportprozessen, die durch die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben werden - im Gegensatz zur linearen Quantenmechanik - bei festem chemischen Potential  $\mu$  der Kondensattransport durch einen Materiewellenleiter limitiert ist.

### 4.2.2 Stationäre Streuzustände

Im Gegensatz zum vorherigen Abschnitt lassen wir nun im Wellenleiter eine Potentialbarriere  $V_{\parallel}(x)$ , die als Streupotential fungiert, zu. Wir nehmen an, dass

$V_{\parallel}(x)$  in der Upstream-Region ( $x \rightarrow -\infty$ ) und Downstream-Region ( $x \rightarrow +\infty$ ) so klein wird, dass es dort vernachlässigt werden kann und somit in sehr guter Näherung lediglich auf einem endlichem Raumbereich verschieden von 0 ist. Ziel dieses Abschnitts ist es, Transportprozesse durch Wellenleiter als stationäres Streuproblem zu formulieren und ein qualitatives Bild von den zu erwartenden stationären Zuständen zu erhalten. Da es sich um einen Streuvorgang handelt, bezeichnen wir diese Zustände als *stationäre Streuzustände*.

Im Falle nicht-wechselwirkender Teilchen ( $g = 0$ ) handelt es sich dabei um ein Standardproblem der quantenmechanischen Streutheorie, denn in Up- und Downstream Region können aufgrund des Superpositionsprinzips einlaufende, reflektierte und transmittierte Teilchenstromkomponenten gemäß (4.2) eindeutig definiert werden, und die Amplituden  $a$ ,  $r$  und  $t$  der asymptotischen ebenen Wellen  $\exp(\pm i k x)$  sind eineindeutig über eine Streumatrix  $\underline{\mathcal{S}}$  verbunden [48]. Dieser auf der Linearität des Problems beruhende Formalismus ist nun aber für Materiewellen, die einer nichtlinearen Gross-Pitaevskii-Gleichung gehorchen, nicht mehr anwendbar, somit muss eine neue Herangehensweise an das Problem gefunden werden.

In Kapitel 3.3.2 wurde gezeigt, dass bei gegebenen Parametern  $\mu$ ,  $g$  und  $j$  eine Lösung der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung eindeutig dadurch bestimmt ist, wenn an einem Ort  $x_0$  die Amplitude  $A(x_0)$  und deren Ableitung  $A'(x_0)$  vorgegeben wird. Dies wollen wir benutzen, um eine geeignete Definition der stationären Streuzustände zu finden: Wir fordern in Analogie zum linearen eindimensionalen Streuproblem für  $\psi(x)$  in der Downstream Region folgendes asymptotisches Verhalten

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{i k x}, \quad \text{mit} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mu} > 0, \\ A &= \sqrt{n} = \text{const} \\ &\text{für } x \rightarrow \infty; \end{aligned} \tag{4.11}$$

das heißt, wir fordern eine nach rechts auslaufende ebene Welle mit konstanter Dichte  $n$  die den Strom  $j = n \hbar k / m$  trägt. Aufgrund der Betrachtungen in Kapitel 3.3.3 wissen wir, dass es bei geeigneter Wahl der Parameter  $[g, j, \mu]$  zwei Werte,  $n_1$  und  $n_2$  (vgl. (3.76)), für die Dichte  $n = A^2$  gibt, die die Dispersionsrelation

$$\mu = \frac{m j^2}{2 n^2} + g n \tag{4.12}$$

einer ebenen Welle erfüllen.

Wir wählen für die asymptotische Randbedingung (4.11) den kleineren Dichtewert, fordern also  $A = \sqrt{n_1}$ . Diese Wahl ist durch zwei Gründe motiviert: Zum einen wissen wir, dass die Schallgeschwindigkeit für die Lösung mit Dichte  $n_1$

kleiner ist als die Propagationsgeschwindigkeit des Kondensats, und somit phononische Anregungen, die durch die Streuung des Kondensats an einer Potentialbarriere entstehen, sich lediglich in der Upstream Region ausbreiten können. Deswegen ist sichergestellt, dass in der Downstream Region stets eine ungestörte auslaufende ebene Welle gefunden wird (eine genaue Diskussion dieses Sachverhalts findet sich in [71, 93]). Zudem werden wir in Kapitel 4.3 eine zeitabhängige Integration der Gross-Pitaevskii-Gleichung durchführen, und das graduelle Anfüllen eines anfänglich leeren Wellenleiters mit einer monochromatischen Materiewelle simulieren. Es wird sich dabei herausstellen, dass dabei die Lösung mit der Kondensatdichte  $n_1$  populiert wird. Diese beiden Überlegungen motivieren somit die Definition des asymptotischen Streuzustandes in der Downstream-Region.

Nun, da wir einen geeigneten asymptotischen Zustand in der Downstream Region für unser Streuproblem gefunden haben, reduziert sich die Berechnung der stationären Streuzustände auf ein Anfangswertproblem für die Differentialgleichung (3.50)

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} A'' + \frac{m}{2} \frac{j^2}{n^2} A + V_{\parallel}(x) A + \epsilon(n) A.$$

Diese Gleichung für die Amplitude läßt sich formal von der Downstream- ( $x \rightarrow -\infty$ ) zur Upstream-Region ( $x \rightarrow +\infty$ ) integrieren, wobei in der Downstream-Region die Anfangsbedingungen  $A = \sqrt{n_1}$  und  $A' = 0$  gelten mögen. Mittels dieser Integration finden wir das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion in der Upstream-Region. Da dort das Potential  $V_{\parallel}(x)$  verschwindet, ist dort die asymptotische Wellenfunktion - sofern eine stationäre Lösung existiert - durch eine der in Kapitel 3.3.3 diskutierten Eigenmoden der Gross-Pitaevskii-Gleichung in uniformen Wellenleitern gegeben.

Im Allgemeinen ist diese Integration nur dann analytisch durchführbar, wenn das Potential  $V_{\parallel}(x)$  stückweise stetig ist, denn dann ist die Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung durch eine stückweise Aneinanderreihung der in Kapitel 3.3.3 diskutierten Eigenmoden gegeben, welche an den Unstetigkeitsstellen  $x_u$  von  $V_{\parallel}(x)$  den Stetigkeitsbedingungen  $\psi(x_u - 0) = \psi(x_u + 0)$  und  $\psi'(x_u - 0) = \psi'(x_u + 0)$  gehorchend aneinandergefügt werden. Auf diese Weise lassen sich die stationären Streumoden in idealisierten Potentiallandschaften, wie zum Beispiel einer einzelnen Potentialstufe [71, 94] oder eines attraktiven Potentialtopfes [92] finden. Streumoden in einem beliebig vorgegebenen Potential  $V_{\parallel}(x)$  können - bis auf wenige artifizielle Sonderfälle - nicht analytisch berechnet werden, da bei der Integration von (3.50) der Term

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x} V(\tilde{x}) A A' \quad (4.13)$$

auftritt.

Im Bilde des in Kapitel (3.3.2) eingeführten klassischen Analogons stellt der Term  $AV_{\parallel}(x)$  in der Bewegungsgleichung (3.50) eine externe treibende Kraft dar, und das Integral (4.13) gibt die an das fiktive klassische Teilchen übertragene Energie  $\Delta E$  an. Da das Potential  $V_{\parallel}(x)$  nur auf einem endlichen Bereich (z.B. für  $x \in [x_1 \dots x_2]$ ) verschieden von 0 ist, existieren für Up- und Downstream-Region jeweils Integrationskonstanten  $E_d$  und  $E_u$ , die das asymptotische Verhalten der Wellenfunktion eindeutig bestimmen. Da wir in der Downstream-Region eine ebene Welle der Form  $\psi(x) = \sqrt{n_1} \exp(ikx)$  annehmen, gilt  $E_d = E_{min}$ . Der Wert  $E_u$  ist durch

$$E_u = E_d + \Delta E = E_d + \int_{x_2}^{x_1} d\tilde{x} V(\tilde{x}) AA' \quad (4.14)$$

gegeben. Wir können nun auch Vorhersagen über die Existenz eines nicht-divergierenden stationären Streuzustandes im Wellenleiter machen: Ist die Ungleichung

$$\Delta E < E_{max} - E_{min} \quad (4.15)$$

erfüllt, so existiert in der Upstream Region eine Eigenmode, deren Dichte  $n(x)$  die Ungleichung

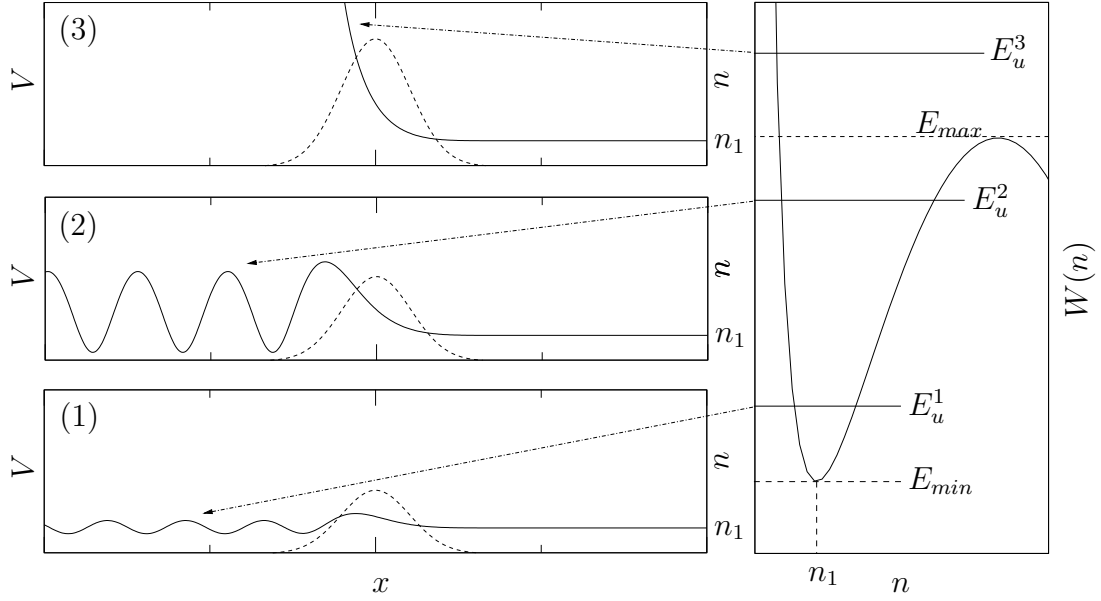
$$n(x) < n_2 \quad \text{für } x < x_1 \quad (4.16)$$

erfüllt. Im Falle  $\Delta E > E_{max} - E_{min}$  kann das fiktive klassische Teilchen das lokale Minimum des klassischen Potentials  $W(n)$  verlassen, und seine Trajektorien sind nicht mehr gebunden.

Numerisch berechnen wir Streumoden in einem beliebig vorgegeben Potential  $V_{\parallel}(x)$  mittels Integration des zu (3.50) äquivalenten Hamiltonschen Systems von Bewegungsgleichungen (3.70). Wir illustrieren dies am einfachen Beispiel eines Gaußförmigen repulsiven Streupotentials

$$V_{\parallel}(x) = V_0 \exp(-x^2/\sigma^2) \quad \text{mit } V_0, \sigma > 0. \quad (4.17)$$

Numerische Ergebnisse für drei verschiedene Werte von  $V_0$  werden in Abb.4.3 präsentiert. Die linke Seite der Abbildung zeigt die Kondensatdichte im Wellenleiter, wobei in der Downstream Region immer die gleichen Randbedingungen für die auslaufende Welle gewählt wurden ( $E_d = E_{min}$ ). Die Höhe der repulsiven Potentialbarriere und somit auch der Energieübertrag  $\Delta E = E_u - E_{min}$  nimmt von Beispiel (1) bis (3) zu. Die rechte Seite der Abbildung zeigt das klassische Potential  $W(n)$  und gibt die klassischen Energien  $E_u^i$ ,  $i = 1..3$ , die die Eigenmoden in der Upstream-Region festlegen, an. In Beispiel (1) und (2) ist  $V_0$  so gewählt, dass  $\Delta E < E_{max} - E_{min}$  und in der Upstream-Region bleibt  $n(x)$  endlich. In Beispiel (3) übersteigt  $\Delta E$  den kritischen Wert  $E_{max} - E_{min}$  und die Dichte divergiert gegen unendlich; für diesen Fall existiert kein physikalisch sinnvoller stationärer Streuzustand mehr.



**Abbildung 4.3:** Die linke Seite der Abbildung zeigt drei typische Beispiele für Streumoden in einem Wellenleiter mit Gaußförmiger repulsiver Potentialbarriere  $V_{||}(x) = V_0 \exp(-x^2/\sigma^2)$ . Die Höhe  $V_0$  der Barriere nimmt von Beispiel (1) bis (3) zu. Die rechte Seite zeigt das klassische Potential  $W(n)$  in der Upstream-Region und gibt die zu den Upstream-Eigenmoden gehörenden klassischen Energien  $E_u^1, E_u^2, E_u^3$  an; in Beispiel (1) und (2) bleibt die Dichte  $n(x)$  im ganzen Wellenleiter endlich, während die Dichte bei (3) divergiert und somit kein physikalisch sinnvoller stationärer Streuzustand mehr existiert.

### 4.2.3 Näherungsverfahren zu Berechnung von Transmissionen

Wir haben in Kapitel 4.2.2 stationäre Transportprozesse als Streuproblem formuliert. Da die betrachteten Streuzustände der nichtlinearen Gross-Pitaevskii-Gleichung gehorchen, können wir hier nicht, wie im Fall nichtwechselwirkender Teilchen, unter Verwendung des asymptotischen Verhaltens (4.2) des linearen Streuzustandes die Transmission als  $T = |t|^2/|a|^2$  und die Reflexion als  $R = |r|^2/|a|^2$  darstellen.

Wir formulieren nun in Anlehnung an [94] ein Verfahren, das es erlaubt, im Regime schwacher Nichtlinearitäten beziehungsweise kleiner Rückreflexionen, näherungsweise Werte für die Transmission  $T$  und die Reflexion  $R$  zu berechnen. Dazu betrachten wir unter der Annahme, dass der stationäre Streuzustand nicht divergiert die Dichteoszillationen  $n(x)$  dieses Zustandes in der Upstream-Region. Dort gehorcht die Amplitude der Wellenfunktion  $A(x) = \sqrt{n(x)}$  der Bewegungsglei-

chung (vgl. (3.59))

$$E_u = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d\sqrt{n}}{dx} \right)^2 + W(n) \quad \text{mit } W(n) = \frac{m}{2n} j^2 + \mu n - \frac{1}{2} g n^2; \quad (4.18)$$

Wir schreiben nun die Dichte  $n(x)$  in der Form

$$n(x) = n_1 + \delta n(x); \quad (4.19)$$

$\delta n(x)$  beschreibt also Abweichungen vom konstanten Dichtewert  $n_1$ . Damit finden wir

$$E_u = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\delta n')^2}{4(n_1 + \delta n)} + \frac{m j^2}{2(n_1 + \delta n)} + \mu(n_1 + \delta n) - \frac{g}{2}(n_1 + \delta n)^2. \quad (4.20)$$

Multiplizieren wir die Gleichung (4.20) mit dem Faktor  $(n_1 + \delta n)$ , so finden wir nach kurzer Umformung

$$\begin{aligned} [E_u - W(n_1)] &= \frac{\hbar^2}{8m} \frac{(\delta n')^2}{n_1} + \left[ 2n_1\mu - \frac{3}{2}g n_1^2 - E \right] \frac{\delta n}{n_1} \\ &\quad + \left( \mu - \frac{3}{2}g n_1 \right) \frac{\delta n^2}{n_1} - \frac{g}{2} \frac{\delta n^3}{n_1}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die linke Seite ist die bereits von (4.13) her bekannte Energieänderung  $\Delta E$ . Wir führen nun zwei für die Dichteoszillationen in der Upstream-Region charakteristische Größen ein. Wir definieren eine effektive Wellenzahl

$$\kappa = k \sqrt{1 - \frac{1}{2\xi^2 k^2}}, \quad (4.22)$$

wobei  $\xi = \hbar/\sqrt{2mn_1g}$  die Healing-Länge [3] des Kondensates ist; der Wellenvektor  $k$  ist über die kinetische Energie der ebenen Welle  $\sqrt{n_1} \exp(ikx)$  in der Dispersionsrelation der Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g n_1^2 \quad (4.23)$$

definiert (für  $g = 0$  gilt  $\kappa = k$ ). Als zweite Größe führen wir

$$\delta n_1 = \frac{m}{\hbar^2 \kappa^2} [E_u - W(n_1)] \quad (4.24)$$

ein; es wird sich zeigen, dass  $\delta n_1$  die Größenordnung der Dichteoszillationen in der Upstream-Region bestimmt. Unter Verwendung von (4.22), (4.23), (4.24) und der Beziehung  $j = n_1 \hbar k / m$  lässt sich (4.21) nach kurzer Rechnung in der Form

$$\left( \frac{d\delta n}{dx} \right)^2 + 4\kappa^2 \delta n^2 = 8\kappa^2 \delta n_1 (n_0 + \delta n) + \frac{4mg}{\hbar^2} \delta n^3 \quad (4.25)$$

schreiben.

Wir führen nun eine Näherung ein und vernachlässigen in (4.25) den Term von der Ordnung  $\mathcal{O}(\delta n^3)$ . Es lässt sich zeigen [94], dass diese Näherung im Regime

$$\left| \frac{\delta n}{n_1} \right| \ll \kappa^2 \xi^2; \quad (4.26)$$

gültig ist. Die daraus resultierende linearisierte Differentialgleichung

$$\left( \frac{d\delta n}{dx} \right)^2 + 4\kappa^2 \delta n^2 = 8\kappa^2 \delta n_1 (n_0 + \delta n) \quad (4.27)$$

wird durch einen Ansatz der Form

$$\delta n(x) = \alpha + \beta \cos(\kappa x + \Theta) \quad (4.28)$$

gelöst. Bestimmt man durch Einsetzen die reellen Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$ , so finden wir schließlich

$$n(x) = n_1 + \delta n(x) = n_1 + \delta n_1 + \sqrt{2n_1\delta n_1 + (\delta n_1)^2} \cos(\kappa x + \Theta). \quad (4.29)$$

Die Dichte oszilliert um einen festen Mittelwert  $n_1 + \delta n_1$  mit einer Amplitude  $\sqrt{2n_1\delta n_1 + (\delta n_1)^2}$ . Die Periodizität der Oszillation ist durch  $\kappa^{-1}$  bestimmt (dies rechtfertigt es,  $\kappa$  als Wellenzahl zu bezeichnen). Dieses Dichteprofil (4.29) hat die gleiche Form, die man erhält, wenn man das Dichteprofil von zwei superponierten in entgegengesetzte Raumrichtungen propagierenden ebenen Wellen betrachtet:

$$\begin{aligned} n(x) &= |\psi_i(x) + \psi_r(x)|^2, \\ \text{mit} \quad \psi_i(x) &= \sqrt{n_1 + \frac{\delta n_1}{2}} \exp(i\kappa x/2), \\ \psi_r(x) &= \sqrt{\frac{\delta n_1}{2}} \exp(-i\kappa x/2 + i\theta). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Die Identifizierung der beiden Materiewellenkomponenten  $\psi_i(x)$  und  $\psi_r(x)$  erlaubt nun eine näherungsweise Berechnung von Transmission  $T$  und Reflexion  $R$  für einen stationären Streuzustand im Wellenleiter; die Transmission ist definiert als das Verhältnis der Teilchendichte  $n_1$  der auslaufenden Welle in der Downstream Region und die Reflexion ist das Verhältnis der Teilchendichten von der reflektierten und der einlaufenden ebenen Materiewellen:

$$\begin{aligned} T &= \frac{n_1}{n_1 + \delta n_1/2} = \left( 1 + \frac{\delta n_1}{2n_1} \right)^{-1}, \\ R &= \frac{\delta n_1/2}{n_1 + \delta n_1/2} = \left( 1 + \frac{2n_1}{\delta n_1} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.31)$$



Es ist zu beachten, dass diese Analyse nur dann sinnvolle Ergebnisse liefert, wenn  $k \xi \gg 1$  erfüllt wird. Betrachten wir nämlich die zu den ebenen Wellen  $\psi_i(x)$  und  $\psi_r(x)$  gehörenden Ströme

$$\begin{aligned} j_i &= \left( n_1 + \frac{\delta n_1}{2} \right) \frac{\hbar \kappa}{m}, \\ j_r &= \frac{\delta n_1}{2} \frac{\hbar \kappa}{m}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

und beachten, dass der auslaufende Strom  $j_t$  in der Downstream-Region die Form

$$j_t = n_1 \frac{\hbar k}{m} \quad (4.33)$$

hat, so erkennen wir, dass die Teilchenstromerhaltungsrelation

$$j_t = j_i - j_r \stackrel{(4.32)}{\Longleftrightarrow} n_1 \frac{\hbar k}{m} = n_1 \frac{\hbar \kappa}{m} \quad (4.34)$$

nur im Limes  $\kappa \rightarrow k$  exakt erfüllt wird. Mit der Definition von  $\kappa$  (4.22) sehen wir, dass dann die Näherung für  $k \xi \gg 1$  gut ist.

Wir fassen zusammen, dass das hier eingeführte Verfahren dann erfolgreich eingesetzt werden kann, wenn die beiden Ungleichungen

$$1 \ll k \xi, \quad \left| \frac{\delta n}{n_1} \right| \ll \kappa^2 \xi^2 \quad (4.35)$$

erfüllt werden. Dies ist typischerweise dann der Fall, wenn wir uns im Regime schwacher Nichtlinearitäten bewegen, oder die rückreflektierte Materiewellenkomponente im Vergleich zur einfallenden Komponente sehr klein ist. Die Transmissions- und Reflexionsformeln (4.31) können für eine mittels der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.70) numerisch errechneten Streumode leicht ausgewertet werden: Da die Anfangsbedingungen in der Downstreamregion für die auslaufende ebene Welle vorgegeben werden, sind  $k$ ,  $\xi$ ,  $n_1$  und  $W(n_1)$  bekannt. Die klassische Energie  $E_u$  kann mittels (4.18) leicht numerisch ausgewertet werden, um damit den Parameter  $\delta n_1$  und somit schlussendlich  $T$  und  $R$  zu bestimmen.

#### 4.2.4 Adiabatische Transmission

Das in Kapitel 4.2.3 besprochene Verfahren kann lediglich approximative Werte für die Transmission und Reflexion eines stationären Streuzustandes liefern, da wir im gesamten betrachteten Wellenleiter eine gleichbleibende effektive Teilchenwechselwirkung  $g$  angenommen haben, und somit auch bei sehr kleinen Werten für  $g$  das Superpositionsprinzip genaugenommen ungültig bleibt. Wir entwickeln

im Folgenden einen konzeptionell anders gearteten Ansatz. Wir untersuchen dazu die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\mu\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V_{\parallel}(x)\psi(x) + g(x)|\psi(x)|^2\psi(x), \quad (4.36)$$

lassen nun aber eine explizite Ortsabhängigkeit des Wechselwirkungsparameters  $g = g(x)$  zu.

Wir betrachten (4.36) zunächst für den Fall  $V_{\parallel}(x) = 0$ . Für  $g = \text{const}$  wird diese Differentialgleichung durch die ebenen Wellen  $\sqrt{n_1}\exp(\pm i\kappa x)$  gelöst (mit  $\kappa = \sqrt{k^2 - \xi^{-2}/2}$ ). Wir fordern nun, dass die Änderung von  $g(x)$  auf einer charakteristischen Längenskala  $x_{ad}$  stattfindet, die viel größer als die Periodenlänge  $2\pi\kappa^{-1}$  der ebenen Welle ist

$$x_{ad} \gg \frac{2\pi}{\kappa}. \quad (4.37)$$

Wir fassen diesen Sachverhalt mittels der Ungleichung

$$\frac{2\pi}{\kappa}|g'(x)| \ll \Delta g \text{ mit } \Delta g \equiv |g(x + x_{ad}/2) - g(x - x_{ad}/2)|. \quad (4.38)$$

In diesem sogenannten *adiabatischen Grenzfall* wird die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.36) (immer noch für den Fall  $V_{\parallel}(x) = 0$ ) durch den adiabatischen Ansatz für die Wellenfunktion

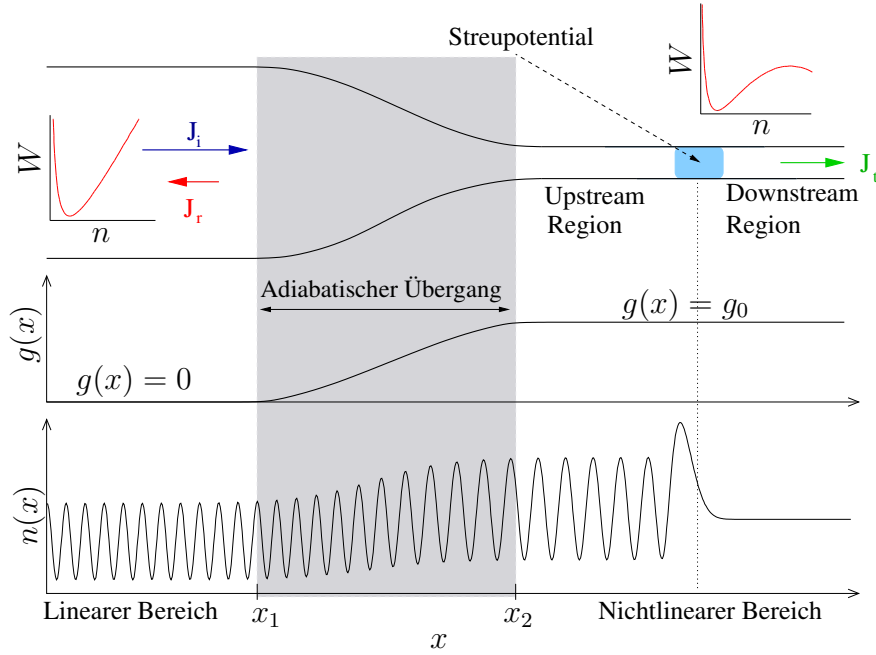
$$\psi_{ad}(x) = \sqrt{n_1(x)} \exp \left[ i \int_{x_0}^x \kappa(\tilde{x}) d\tilde{x} \right] \quad (4.39)$$

gelöst. Die Dichte  $n_1(x)$  und der Wellenvektor  $\kappa(x)$  hängen parametrisch über  $g(x)$  vom Ort  $x$  ab. Insbesondere gibt es in diesem adiabatischen Limes keine am effektivem Potential  $g(x)|\psi(x)|^2$  rückreflektierte Materiewellenkomponente.

Im Folgenden nehmen wir an, dass  $g(x)$  folgenden Bedingungen genügt:

$$\begin{aligned} (a) \quad & g(x) \text{ monoton steigend,} \\ (b) \quad & |g'(x)| \leq |g(x + x_{ad}/2) - g(x - x_{ad}/2)|x_{ad}^{-1} \ll (\kappa/2\pi)\Delta g \\ & \text{(Adiabatizitätsbedingung),} \\ (c) \quad & g(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < x_1 \\ g_0 & \text{für } x > x_2 \end{cases} \\ & \text{mit } x_1 < x_2 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Ein geeigneten Verlauf von  $g(x)$  wird exemplarisch in Abb.4.4 gezeigt: Im Bereich  $x < x_1$  ist  $g(x)$  nahezu null, zwischen den Orten  $x_1$  und  $x_2$  steigt  $g(x)$  adiabatisch an, um für  $x > x_2$  den konstanten Wert  $g(x) = g_0$  anzunehmen. Experimentell

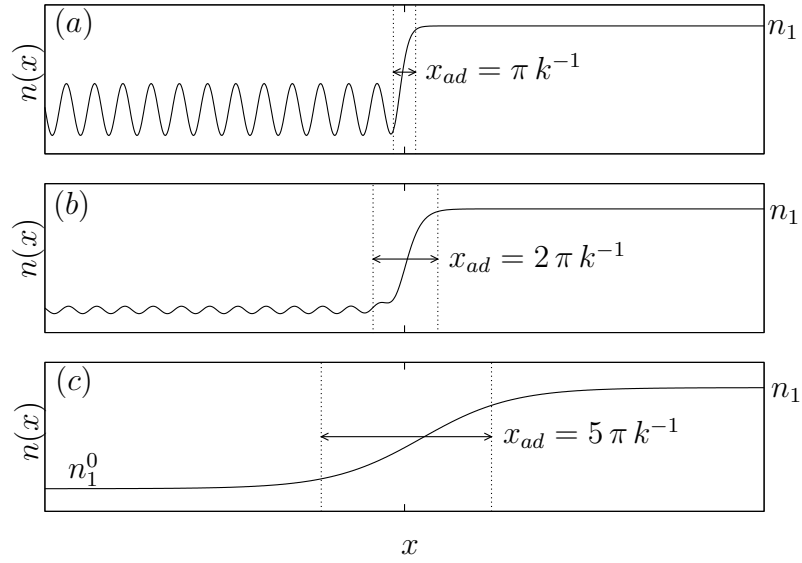


**Abbildung 4.4:** Das obere Drittel der Abbildung zeigt eine Wellenleiterkonfiguration, die einen Raumbereich mit endlicher Teilchenwechselwirkung  $g(x) = g_0$  (für  $x > x_2$ ) mit einem Bereich verschwindender Wechselwirkung  $g(x) \approx 0$  (für  $x < x_1$ ) durch einen adiabatischen Übergang (grau schattiert) verbindet. Wegen des Zusammenhangs  $g(x) = 2a_s \hbar \omega(x)$  wird der Wellenleiter im linearen Bereich ( $x < x_1$ ) lateral stark aufgeweitet; dort kann zwischen einfallendem Strom  $j_i$  und reflektiertem Strom  $j_r$  unterschieden werden. Die Potentialbarriere, an dem die Materiewelle gestreut wird, befindet sich rechts vom adiabatischen Übergangsbereich. Der Graph in der Mitte zeigt den zur Wellenleiterkonfiguration gehörenden Verlauf von  $g(x)$ . Die Kurve im unteren Drittel zeigt die Dichte  $n(x)$  eines numerisch errechneten Streuzustandes; die Oszillationsperiode von  $n(x)$  im Bereich  $x < x_1$  ist kleiner als im Bereich  $x > x_2$ , da  $\kappa < k$  gilt. Die Insets zeigen den Verlauf des klassischen Potentials  $W(n)$  jeweils im wechselwirkenden bzw. nicht-wechselwirkenden Bereich des Wellenleiters.

kann dieses Verhalten von  $g(x)$  zum Beispiel durch eine adiabatische Variation der Stärke des radialen harmonischen Einschlusspotentials erreicht werden, da gemäß (3.71)  $g(x) = 2\hbar a_s \omega(x)$  gilt. Solch eine adiabatische Aufweitung des harmonischen Einschlusses ist schematisch in Abb.4.4 dargestellt, wobei  $\omega(x)$  von der Form

$$\omega(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{für } x < x_1, \Rightarrow g(x) = 0 \\ \omega & \text{für } x > x_2 \Rightarrow g(x) = g_0 \end{cases} \quad (4.41)$$

ist. Wir koppeln also einen uniformen Wellenleiter ( $x < x_1$ ), für den eine quasilineare Wellendynamik gilt, mittels eines adiabatischen Übergangsbereichs ( $x_1 < x < x_2$ ) an einen Wellenleiter ( $x > x_2$ ) mit starkem Transversalpotential und nichtlinearer Wellendynamik.



**Abbildung 4.5:** Numerisch errechnete Dichteprofile  $n(x)$  im Wellenleiter ohne Barriere. Der Übergang wird durch (4.42) modelliert. Die Übergangslänge  $x_{ad}$  nimmt von (a) bis (c) zu. Das Verschwinden der Dichteoszillationen für größer werdende  $x_{ad}$  spiegelt das Erreichen des adiabatischen Regimes wieder.  $n_1$  ist die Dichte der ebenen Welle für  $g = g_0$ ,  $n_1^0$  diejenige für  $g = 0$ .

Befindet sich nun rechts vom adiabatischen Übergangsbereich (also  $x > x_2$ ) ein Streupotential  $V_{||}(x)$  im Wellenleiter, so können wir wieder mittels Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.70) die Streumoden im Wellenleiter berechnen; die Integration wird in der Upstream-Region so lange weitergeführt, bis der Bereich  $x < x_1$  erreicht wird. Da dort wegen  $g(x) = 0$  das Superpositionsprinzip für ebene Wellen gilt, kann dort die Wellenfunktion eindeutig in einen einfallenden und reflektierten Anteil aufgeteilt werden. Die Berechnung der Transmission  $T$  und der Reflexion  $R$  kann zum Beispiel mittels des Verfahrens aus Kapitel 4.2.3, das für  $g = 0$  exakte Resultate liefert, geschehen. Um für eine konkrete numerische Rechnung einen geeigneten adiabatischen Übergang und einen geeigneten Wert für  $x_{ad} = x_2 - x_1$  zu bestimmen, führen wir die Integration von der Down- zur Upstream-Region für  $V_{||}(x) = 0$  aus. Adiabaticität ist nämlich dann erreicht, wenn im Bereich  $x < x_1$  keine Dichteoszillationen mehr auftreten, und somit die Rückreflexionen am effektivem Potential  $g(x)|\psi(x)|^2$  vernachlässigbar werden. Dies ist in Abb.4.5 dargestellt; wir modellieren hier den adiabatischen Übergang mittels der funktionalen Abhängigkeit

$$g(x) = \frac{1}{2} g_0 \left[ \tanh \left( \frac{2x}{x_{ad}} \right) + 1 \right] \quad (4.42)$$

und berechnen numerisch  $n(x)$  für verschiedene Werte von  $x_{ad}$ . Wir stellen fest, dass bei sehr plötzlichem Übergang von  $g(x) = 0$  zu  $g(x) = g_0$  starke Rückrefle-

xionen auftreten und die Dichte mit der Periodizität  $\pi k^{-1}$ , während bei anwachsenden Werten für  $x_{ad}$  sehr schnell das adiabatische Regime erreicht wird.

Wir formulieren die Methode des adiabatischen Übergangs nun mit dem aus der Theorie Hamiltonscher Systeme bekanntem Theorem der adiabatischen Invarianz von Wirkungsvariablen. Das betrachtete System von Bewegungsgleichungen (in der Upstream-Region)

$$\begin{aligned} A' &= \frac{m}{\hbar^2} p \\ p' &= \frac{m j_t^2}{A^4} A - 2\mu A + 2g(x)n A. \end{aligned} \quad (4.43)$$

hängt von dem sich langsam verändernden Parameter  $g(x)$  ab. Im Bild der klassischen Dynamik gesprochen bedeutet dies, dass das Potential  $W(n)$  des fiktiven Teilchens adiabatisch von der Konfiguration, die in Abb.4.4 rechts oben skizziert ist, in die Konfiguration, die am linken Bildrand eingezeichnet ist, überführt wird.

Wir sind im Folgenden nur an den gebundenen, periodischen Trajektorien interessiert. Wir führen zunächst die Wirkungsvariable  $\mathcal{J}$  ein [95],

$$\mathcal{J} = \oint p dA, \quad (4.44)$$

wobei über die Periode  $2\pi \kappa^{-1}$  zu integrieren ist. Ändert sich der Parameter  $g$  nun adiabatisch, das heißt, er ändert sich pro Periode nur so wenig, dass (4.38) erfüllt ist, so gilt für die Änderung von  $\mathcal{J}$  im Intervall  $x_{ad}$  die Beziehung  $\Delta\mathcal{J} \sim g'(x)\Delta g$ . Im adiabatischen Limes gilt  $g'(x) \rightarrow 0$ , somit folgt  $\Delta\mathcal{J} \rightarrow 0$  und wir sprechen davon dass die Wirkungsvariable  $\mathcal{J}$  adiabatisch invariant ist [96]. Insbesondere gilt damit für den adiabatischen Übergang, dass die Wirkung  $\mathcal{J}_{g_0}$ , integriert über eine Periode, in der Upstream-Region wo  $g(x) = g_0$  ist, identisch mit der Wirkung  $\mathcal{J}_0$  im linearen Bereich ( $x < x_1$ ) des Wellenleiters ist. Für  $\mathcal{J}_0$  können wir einen einfachen analytischen Ausdruck finden: Im linearen Bereich können wir die Wellenfunktion als

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, \quad \text{mit } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mu} \quad (4.45)$$

schreiben. Die Wellenfunktion (4.45) hat die Amplitude

$$A(x) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \cos(2kx)}, \quad (4.46)$$

der Gesamtstrom (der gleich dem transmittierten Strom ist) lautet,

$$j_t = \frac{\hbar k}{m} (\alpha^2 - \beta^2). \quad (4.47)$$

Für den kanonischen Impuls  $p$  ergibt sich dann

$$p(x) = \frac{\hbar^2}{m} A'(x) = \frac{2\alpha\beta k \sin(2kx)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \cos(2kx)}}. \quad (4.48)$$

Mittels der Beziehung  $dA = A'dx$  können wir  $\mathcal{J}_0$  berechnen:

$$\mathcal{J}_0 = \oint p dA = \frac{\hbar^2}{m} \int_0^{\pi/k} \frac{4\alpha^2\beta^2 k^2 \sin^2(2kx)}{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \cos(2kx)} dx. \quad (4.49)$$

Dieses Integral lässt sich analytisch auswerten; nach kurzer Rechnung finden wir

$$\mathcal{J}_0 = 2\beta^2 \hbar^2 k \pi m^{-1}. \quad (4.50)$$

Verwenden wir nun noch, dass die Reflexion durch  $R = \beta^2/\alpha^2$  gegeben ist, so finden wir mit den Beziehungen (4.47) und (4.50) die Ergebnisse

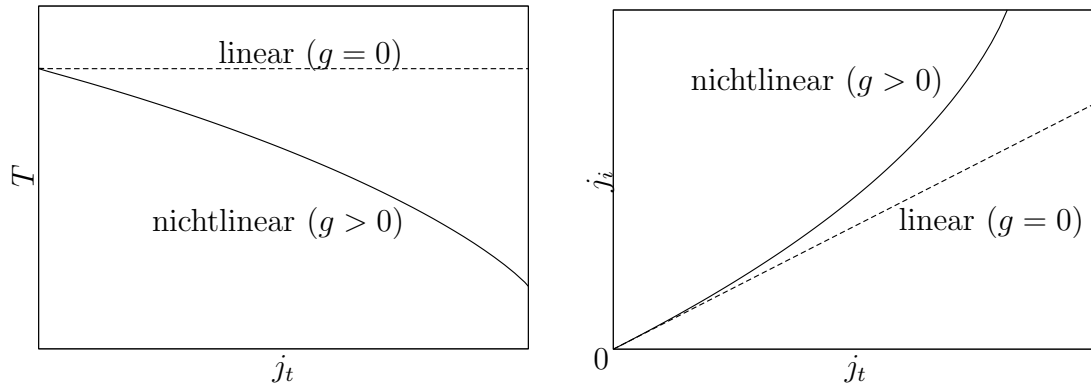
$$R = \left(1 + \frac{2\pi\hbar j_t}{\mathcal{J}_{g_0}}\right)^{-1}, \quad T = 1 - R = \left(1 + \frac{\mathcal{J}_{g_0}}{2\pi\hbar j_t}\right)^{-1}. \quad (4.51)$$

In (4.51) haben wir bereits von der im adiabatischen Limes gültigen Beziehung  $\mathcal{J}_0 = \mathcal{J}_{g_0}$  Gebrauch gemacht. Mit den Relationen (4.51) ist jeder nichtlinearen Upstream-Mode eindeutig ein Transmissions- bzw. Reflexionswert zugeordnet. Im Gegensatz zu  $\mathcal{J}_0$  lässt sich für  $\mathcal{J}_{g_0}$  kein elementarer analytischer Ausdruck angeben, da zur Bestimmung von  $\mathcal{J}_{g_0}$  ein Integral über Jacobi-elliptische Funktionen ausgewertet werden muss, die ihrerseits nur in Form von Integralen dargestellt werden können. Deswegen bestimmen wir bei konkreten Rechnungen den Wert von  $\mathcal{J}_{g_0}$  durch numerisches Auswerten des Integralausdruckes (4.44), da die Größen  $p(x)$  und  $A(x)$  im System der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen direkt zugänglich sind.

Das hier eingeführte Verfahren ist allgemeiner als die Näherungsmethode aus Abschnitt 4.2.3, da es auch im Regime starker Wechselwirkungen bzw. großer Rückreflexionen  $R$  angewendet werden kann. Die damit eingeführte Definition von Transmissionen stellt eine natürliche Erweiterung der Transmissionsdefinition der linearen Quantenmechanik dar. Da unsere Definition auf einem adiabatischen Übergang des Wechselwirkungsparameters beruht, führen wir die Bezeichnung *adiabatische Transmission* ein.

#### 4.2.5 Nichtlineare Strom- und Transmissionscharakteristiken

Im Gegensatz zur linearen Quantenmechanik ist die Transmission nun nicht mehr unabhängig von der Stärke des Stromflusses, sondern weist ein nichtlineares Verhalten auf. Wir illustrieren dies am Beispiel eines Kondensatflusses, der an einem



**Abbildung 4.6:** Links: Transmission  $T$  als Funktion des transmittierten Stromes  $j_t$ . Im linearen Fall ist  $T$  konstant, zeigt aber eine starke Abhängigkeit von  $j_t$ , wenn  $g > 0$  ist. Rechts:  $j_i - j_t$  Charakteristiken für den linearen und einen nichtlinearen Fall.

Gaußförmigen Barrierenpotential (vgl. (4.17)) gestreut wird. Der Streuzustand, dessen Transmission wir bestimmen wollen, ist über die Randbedingungen in der Downstream-Region, insbesondere durch den transmittierten Strom  $j_t$  festgelegt. Daher bietet es sich an, die Transmission  $T$  - bei fest gewählten Parametern  $g$  und  $\mu$  - als Funktion von  $j_t$  darzustellen. Die linke Seite der Abb.4.6 zeigt qualitativ typische Verläufe der Kurve  $T(j_t)$  für den linearen Fall ( $g = 0$ ) und den nichtlinearen Fall ( $g > 0$ ) (die Transmissionswerte wurden mit dem adiabatischen Verfahren aus Abschnitt 4.2.4 berechnet). Wie erwartet, ist für  $g = 0$  der Wert von  $T$  stromunabhängig;  $T$  weist aber ein nichtlineares Verhalten auf, wenn  $g$  verschieden von null ist und nimmt mit größer werdenden Werten von  $j_t$  rasch ab. Die Rechte Seite der Abb.4.6 stellt den über die Relation  $j_i = j_t T^{-1}$  definierten einfallenden Strom  $j_i$  als Funktion von  $j_t$  dar. Lediglich für  $g = 0$  ergibt sich eine lineare  $j_i - j_t$  Charakteristik.

Gibt man, so wie hier, den transmittierten Strom in der Downstream-Region als Randbedingung vor, so nennen wir diese Darstellung, der Literatur folgend [97,98] *Fixed Output Problem*: zu einem vorgegebenen transmittierten Strom wird eindeutig ein einfallender Strom  $j_i$  bestimmt. Oft will man aber genau umgekehrt vorgehen und einem wohldefinierten einfallenden Strom  $j_i$  einen transmittierten Strom zuordnen. Dieses so genannte *Fixed Input Problem* ist im Prinzip dadurch lösbar, indem man mittels der  $j_i - j_t$  Charakteristik für einen vorgegebenen Strom  $j_i$  das zugehörige  $j_t$  identifiziert. Wegen der Nichtlinearität der  $j_i - j_t$  Kurve ist aber nicht gewährleistet, dass diese Zuordnung eindeutig geschehen kann, da zu ein und dem selben Wert  $j_i$  mehrere Werte für  $j_t$  gehören können. Wir werden in Abschnitt 5.2 solche Multistabilitäten diskutieren, wenn wir Transport durch ein Doppelbarrierenpotential untersuchen.

### 4.3 Zeitabhängige Transportprozesse

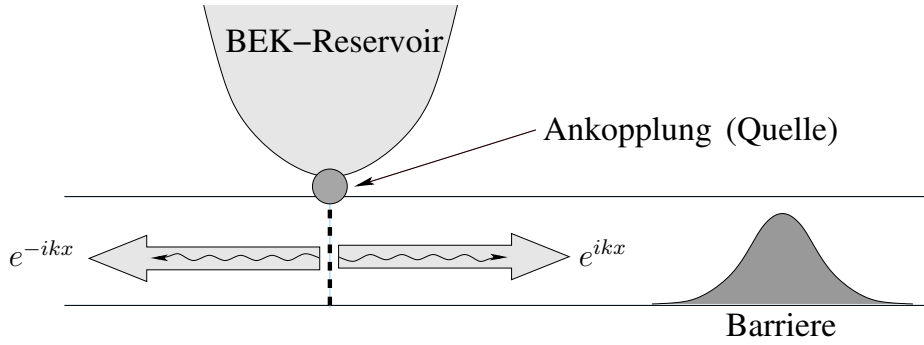
Bisher haben wir uns darauf beschränkt, die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung zu betrachten und ihre stationären Lösungen zu bestimmen. Wir beabsichtigen nun Fragestellungen zu untersuchen, die sich im Rahmen der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung nicht beantworten lassen. Insbesondere soll den Fragen nachgegangen werden, ob und unter welchen Umständen sich die stationären Transportmoden populieren lassen und welche Eigenschaften ihre dynamische Stabilität aufweist. Unter dynamischer Stabilität verstehen wir die Eigenschaft des Systems, nach einer Auslenkung aus einer Gleichgewichtslage, bzw. eines stationären Zustands, wieder zu dieser Gleichgewichtslage zurückzukehren, wenn man die weitere zeitliche Evolution des Systems betrachtet. Ist ein System dynamisch instabil, so genügt eine kleine, kurzzeitig wirkende Störung, dem System eine anhaltende zeitabhängige Dynamik aufzuprägen. Dynamische Instabilität von Bose-Einstein-Kondensaten wird im Kontext von Bose-Einstein Kondensaten zum Beispiel im Zusammenhang mit periodischen Fallenstrukturen [99], oder auch rotierenden Vortizes [100] diskutiert.

Des Weiteren haben wir bereits den Fall angesprochen, dass zu einem vorgegebenem  $j_i$  mehrere mögliche Transportmoden mit verschiedenen Werten für  $j_t$  existieren; hier stellt sich natürlich die Frage, welche dieser Moden in einem realistischen zeitabhängigen Transportprozess populiert wird. Diese Frage wird uns vor allem beschäftigen, wenn wir den Transport durch Doppelbarrierenpotentiale untersuchen. Deswegen wollen wir im Folgenden eine Methode entwickeln, die es ermöglicht, realistische Transportprozesse - auch zeitabhängig - zu simulieren.

Bei einem realistischen Transportexperiment kann in einem zu Anfangs kondensatfreien Wellenleiter ein Streuzustand nur durch einen zeitabhängigen Prozess populiert werden. Daher ist es für dieses Szenario notwendig, explizit die Möglichkeit zeitabhängiger Streuprozesse in Betracht zu ziehen. Wir entwerfen ein einfaches, aber realistisches Transportexperiment, das dazu geeignet ist, die oben gestellten Fragen zu beantworten. Wir stellen uns vor, ein zum Zeitpunkt  $t = 0$  leerer Wellenleiter sei in der Upstream Region lokal an ein Reservoir gekoppelt (vgl. Abb.4.7). Für die Zeiten  $t > 0$  werde eine monochromatische ebene Welle mit wohldefiniertem Strom  $j_i$  in den Wellenleiter emittiert, die im Wellenleiter propagiert und an einem Barrierenpotential gestreut wird. Auf diese Weise wird der Wellenleiter sukzessive mit Materiewellen, die von der lokalen Quelle in der Upstream-Region emittiert werden, gefüllt. Simulieren wir die zeitliche Evolution der Kondensatswellenfunktion  $\psi(x, t)$  durch Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii Gleichung, so können wir zum Beispiel darüber Aussagen machen, ob die Wellenfunktion im Laufe der Zeit gegen einen stationären Zustand konvergiert, oder die Dynamik von  $\psi(x, t)$  zeitabhängig bleibt.

Da in diesem Experiment der einfallende Strom  $j_i$  vorgegeben sei, gehört es zur





**Abbildung 4.7:** Ein Reservoir mit Bose-Einstein-Kondensat sei durch einen hier nicht näher spezifizierten Mechanismus derart an einen Wellenleiter gekoppelt, so dass monochromatische Wellen in den Wellenleiter injiziert werden können. Im Wellenleiter kann sich zusätzlich noch ein Barrierenpotential befinden, an dem die Materiewellen gestreut werden.

Klasse der Fixed-Input Probleme, lässt aber im Gegensatz zu der Betrachtungsweise in Abschnitt 4.2.5 zusätzlich Aussagen über die zeitliche Dynamik des Transportprozesses zu.

### 4.3.1 Implementierung eines Quellterms

Wir zeigen nun, wie man in die Gross-Pitaevskii-Gleichung einen lokalen Quellterm einbauen kann, der monochromatische Materiewellen in den Wellenleiter emittiert, und somit die Ankopplung an ein Kondensatreservoir simuliert. Konkret könnte so ein Ankopplungsmechanismus zum Beispiel durch einen Atom-Laser [101, 102] realisiert werden. Dies ist eine Anordnung, die aus einem Reservoir von Atomen einen kohärenten, monochromatischen Strahl von Atomen auskoppelt, der in einen Wellenleiter injiziert werden kann.

Wir betrachten die durch einen *Quellterm*, der am Ort  $x_0$  platziert sei, modifizierte zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\parallel}(x) + g|\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) + S_0 \exp(-i\mu t/\hbar) \delta(x - x_0). \quad (4.52)$$

Die Amplitude  $S_0$  ist hierbei eine komplexe Zahl, die die Stärke der Quelle bestimmt. Um die Wirkung des Zusatztermes in (4.52) zu verstehen, betrachten wir in diesem Abschnitt den Sonderfall  $V_{\parallel}(x) \equiv 0$  und zeigen, dass in diesem Fall eine Lösung von (4.52) in Form einer ebenen Welle existiert. Dazu drücken wir

zunächst die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  durch ihre Fouriertransformierte  $\tilde{\psi}(q, t)$  aus,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-iqx} \tilde{\psi}(q, t). \quad (4.53)$$

Setzt man dies in (4.52), so findet man, wenn  $n = \text{const}$  ist, nach kurzer Rechnung

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - gn \right) \tilde{\psi}(q, t) = S_0 e^{-iqx_0} e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (4.54)$$

Diese Gleichung erlaubt eine Lösung von der Form

$$\tilde{\psi}(q, t) = \frac{S_0 e^{-iqx_0} e^{-i\mu t/\hbar}}{\mu - gn - \hbar^2 q^2/(2m)}. \quad (4.55)$$

Wir transformieren dies zurück in den Ortsraum

$$\psi(x, t) = \frac{S_0}{2\pi} e^{-i\mu t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq e^{-iq(x+x_0)}}{\mu - gn - \hbar^2 q^2/(2m)}. \quad (4.56)$$

Dieses Hauptwertintegral lässt sich mittels des Residuenkalküls auswerten, und wir erhalten das Ergebnis

$$\psi(x, t) = \frac{S_0 m}{ik\hbar^2} e^{ik|x-x_0|} e^{-i\mu t/\hbar}, \quad \text{mit } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\mu - gn)}. \quad (4.57)$$

Dies ist eine ebene Welle, die für  $x > x_0$  nach rechts und für  $x < x_0$  nach links propagiert. Die Dichte  $n$  der Wellenfunktion lässt sich durch die Amplitude  $S_0$  des Quellterms darstellen; aus (4.57) ergibt sich

$$n = \frac{|S_0|^2 m^2}{\hbar^4 k^2}, \quad (4.58)$$

was sich mit der Dispersionsrelation der ebenen Welle zur Relation

$$n = \frac{|S_0|^2 m}{2\hbar^2(\mu - gn)} \quad (4.59)$$

umformen lässt. Wir berechnen des Weiteren den zur ebenen Welle (4.57) gehörenden Strom

$$j_i = \begin{cases} + \frac{|S_0|^2 m}{\hbar^3 k} \stackrel{(4.58)}{=} + |S_0| \sqrt{n} \hbar^{-1} & \text{für } x > x_0 \\ - \frac{|S_0|^2 m}{\hbar^3 k} \stackrel{(4.58)}{=} - |S_0| \sqrt{n} \hbar^{-1} & \text{für } x < x_0 \end{cases} \quad (4.60)$$

Setzen wir das Ergebnis

$$|S_0| = \frac{\hbar |j_i|}{\sqrt{n}} \quad (4.61)$$

in (4.59) ein, so finden wir die Dispersionsrelation der ebenen Welle

$$\mu = \frac{m j_i^2}{2n^2} + gn \quad (4.62)$$

bei vorgegebenem Stromfluss  $j_i$  wieder. Darum kann die Dichte nur die beiden Werte  $n = n_1$  und  $n = n_2$  annehmen (vgl. Abschnitt 3.3.3).

Konkret gehen wir folgendermaßen vor, wenn wir die Quelle so adjustieren wollen, dass bei gegebenem  $\mu$  und  $g$  ein gewünschter Strom emittiert wird:

- 1) Wir bestimmen aus der Dispersionsrelation (4.62) die Werte  $n_1$  oder  $n_2$  (dies kann beispielsweise numerisch geschehen).
- 2) Wir setzen  $n = n_1$  oder  $n = n_2$  in (4.61), um  $|S_0|$  zu berechnen.
- 3) Die zugehörigen Wellenvektoren werden über  $\hbar k = \sqrt{2m(\mu - ng)}$  bestimmt.

Gibt man sich eine Quellstärke  $|S_0|$  vor, so können die zugehörigen Teilchendichten durch Auflösen der quadratischen Gleichung (4.59) gefunden werden

$$n_{1,2} = \frac{1}{2g} \left( \mu \mp \sqrt{\mu^2 - \frac{2gm|S_0|^2}{\hbar^2}} \right). \quad (4.63)$$

Damit sichergestellt ist, dass eine Lösung mit stationärer Dichte existiert, muss  $|S_0|$  die Ungleichung

$$|S_0| < \frac{\hbar \mu}{\sqrt{2gm}} \quad (4.64)$$

erfüllen (dies ist äquivalent zum Sattelpunktkriterium (3.75)). Wir haben somit gezeigt, dass der Quellterm in der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.3.1) in beide Richtungen eine ebene Welle mit wohldefiniertem Strom  $j_i$  emittiert.

### 4.3.2 Zeitabhängige Emission von Materiewellen

Wir verallgemeinern nun unsere Betrachtungen vom vorhergehenden Abschnitt und lassen eine zeitliche Modulationen der Amplitude des Quellterms zu; letzterer nimmt dann die allgemeine Form

$$S(x, t) = S_0 f(t) \exp(-i\mu t/\hbar) \delta(x - x_0) \quad (4.65)$$

an, wobei  $f(t)$  eine beliebige zeitabhängige reelle Funktion sei. Solche zeitabhängigen Prozesse sind, wie oben schon erklärt, wichtig im Hinblick auf realistische, experimentell implementierbare Transportprozesse.

Wir betrachten nun einen zum Zeitpunkt  $t = 0$  leeren Wellenleiter, das heißt,  $\psi(x, t = 0) \equiv 0$ , der nun sukzessive mit von der Quelle emittierten monochromatischen Materiewellen gefüllt werden soll. Die Kopplung an das Reservoir wird also für  $t > 0$  aktiviert; dies können wir durch  $f(t) = 0$  für  $t \leq 0$  und  $f(t) \neq 0$  für  $t > 0$  modellieren.

Wir betrachten zur Illustration eines solchen *Einschaltvorgangs* den einfachen Fall, dass die Amplitude der Quelle instantan von  $S = 0$  auf einen konstanten Wert  $S = S_0$  hochgedreht wird und nehmen zudem an, die Teilchen bewegen sich wechselwirkungsfrei ( $g = 0$ ). Die Wellengleichung nimmt damit die Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + S_0 \theta(t) \exp(-i\mu t/\hbar) \delta(x) \quad (4.66)$$

an (die Quelle ist hier bei  $x = 0$  lokalisiert). Um diese Gleichung zu lösen, bestimmen wir die *Greensche Funktion*  $G(x - x', t - t')$  der Schrödingergleichung (4.66)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x - x') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G(x - x') + \delta(t - t') \delta(x - x') . \quad (4.67)$$

Wir gehen über zur Fourierdarstellung

$$G(x - x', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-iq(x-x')} e^{-i(\omega+i\delta)(t-t')} G(q, \omega); \quad (4.68)$$

dabei ist  $\delta$  eine infinitesimal kleine, positive Zahl, die die Konvergenz des Integrals sicherstellt [103] (Kausalität der retardierten Greenschen Funktion). Setzen wir (4.68) in (4.67) ein, so finden wir

$$G(q, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \tilde{a}q^2 + i\delta}, \quad (4.69)$$

mit  $\tilde{a} \equiv \hbar^2/(2m)$ . Wir bestimmen als nächstes  $G(q, t)$

$$G(q, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\hbar\omega - \tilde{a}q^2 + i\delta}; \quad (4.70)$$

das Integral lässt sich mit dem Residuenkalkül auswerten und ergibt

$$G(q, t) = -ie^{-i\tilde{a}q^2(t-t')} \theta(t - t'). \quad (4.71)$$

Die Rücktransformation auf die Greensche Funktion  $G(x - x', t - t')$  führt auf das elementar zu lösende Gaußsche Integral

$$G(x - x', t - t') = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-i\tilde{a}q^2(t-t')} \theta(t - t') e^{-ik(x-x')}, \quad (4.72)$$

und wir finden nach kurzer Rechnung die Greensche Funktion der Schrödinger-Gleichung

$$G(x - x', t - t') = -\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{4\pi\tilde{a}(t-t')}} \exp\left(i \frac{(x-x')^2}{4\tilde{a}(t-t')}\right) \theta(t - t'). \quad (4.73)$$

Die Lösung der Differentialgleichung ist dann durch

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' S_0 \theta(t) \exp(-i\mu t/\hbar) \delta(x) G(x - x', t - t') \\ &= \frac{-\sqrt{i} S_0}{2\sqrt{\tilde{a}\pi}} \int_0^t dt' \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \exp\left(i \frac{x^2}{4\tilde{a}(t-t')} - i\mu t'\right) \end{aligned} \quad (4.74)$$

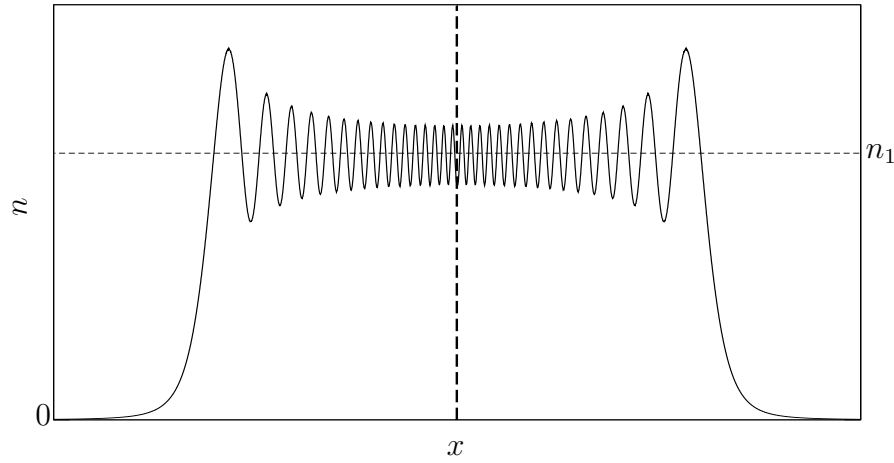
gegeben. Für dieses Integral existiert die geschlossene Darstellung [104]

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{-iS_0\sqrt{2m}}{4\hbar\sqrt{\mu}} e^{-i\mu t/\hbar} \left[ 2i \sin(k|x|) - e^{ik|x|} \operatorname{erf}\left(e^{-i\pi/4} \sqrt{\mu t/\hbar} + e^{-i\pi/4} \frac{|x|}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 t}}\right) \right. \\ &\quad \left. + e^{-ik|x|} \operatorname{erf}\left(-e^{-i\pi/4} \sqrt{\mu t/\hbar} + e^{-i\pi/4} \frac{|x|}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 t}}\right) \right] \\ \text{mit} \quad \operatorname{erf}(u) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u du' \exp(-u'^2) \quad \text{und} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mu}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Im Limes langer Zeiten gilt

$$\psi(x, t) \longrightarrow \frac{S_0 m}{ik\hbar^2} e^{ik|x|} e^{-i\mu t/\hbar}, \quad \text{für } t \longrightarrow \infty. \quad (4.76)$$

(Dies lässt sich durch eine Grenzwertanalyse der erf-Funktion zeigen (vgl. [104])). Damit haben wir gezeigt, für nicht-wechselwirkende Teilchen wird im Limes  $t \rightarrow \infty$  ein monochromatischer Zustand, der einen gewünschten Strom  $j_i$  trägt, populiert. Abb.4.8 zeigt das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $|\psi(x, t)|^2$  zu einer Zeit  $t > 0$ , wobei die Quelle mittig positioniert ist; links und rechts der Quelle breitet sich symmetrisch eine Wellenfront aus, deren Dichte im Limes



**Abbildung 4.8:** Das Bild zeigt die Teilchendichte  $|\psi(x,t)|^2$  zu einer Zeit  $t > 0$ . Die Quelle ist bei der vertikalen gestrichelten Linie positioniert; links und rechts von der Quelle breitet sich symmetrisch eine Wellenfront mit starken Dichteoszillationen aus. Im Limes  $t \rightarrow \infty$  konvergiert  $|\psi(x,t)|^2$  gegen den konstanten Wert  $n_1 = \hbar^2 j_i^2 / |S_0|^2$  (markiert durch die horizontale Gerade).

$t \rightarrow \infty$  gegen den konstanten Wert  $n_1 = \hbar^2 j_i^2 / |S_0|^2$  konvergiert. Das eben diskutierte abrupte Einschalten des Quellterms hat zwei Nachteile: Zum einen wird der gewünschte Zustand erst nach relativ langen Zeiten erreicht; zum anderen lässt sich die oben gezeigte Rechnung nicht auf den nichtlinearen Fall ( $g > 0$ ) übertragen, da das lineare Superpositionsprinzip ungültig wird und darum die Bestimmung einer Lösung mittels einer Greenschen Funktion nicht möglich ist.

Wir entwickeln nun ein numerisch implementierbares Verfahren, das zum einen schnell gegen stationäre Zustände - falls sie existieren und dynamisch stabil sind - konvergiert und zudem auch im nichtlinearen Fall anwendbar ist. Anstelle eines abrupten Einschaltens des Quellterms erhöhen wir nun die Amplitude  $S(x,t)$  des Quellterms *adiabatisch* von  $S = 0$  bis zu einem gewünschten Maximalwert  $S_0$ , der einem vorgegebenem Strom  $j_i$  entspricht. Die Funktion  $f(t)$ , die gemäß (4.65) die Zeitabhängigkeit der Quelle modelliert, soll also den Anforderungen

$$(a) \quad f(t) \text{ monoton steigend,}$$

$$(b) \quad g(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1 & \text{für } t > t_1, \text{ mit } 0 < t_1 \end{cases},$$

$$(c) \quad \tau \frac{d}{dt} f(t) \ll 1, \quad (\text{Adiabatzitätsbedingung}),$$

$$\text{mit } \tau = 2\pi\hbar/\mu \tag{4.77}$$

genüge leisten. Die Adiabatzitätsbedingung bedeutet, dass die zeitliche Änderung der Quellstärke  $S(x,t) = S_0 f(t)\delta(x - x_0)$  auf Zeitskalen von statten geht,

die viel größer sind als die durch das chemische Potential  $\mu$  vorgegebene charakteristische Periodizität  $\tau = 2\pi\hbar/\mu$ .

Wir haben nun noch einen geeigneten Wert für  $S_0$  zu bestimmen. Aus Abschnitt 3.3.3 ist bekannt, dass die Dispersionsrelation der Gross-Pitaevskii-Gleichung für stationäre ebene Wellen (4.62) zwei Dichtewerte  $n = n_1, n_2$  zulässt. Aus im Folgenden noch zu erläuternden Gründen wählen wir die Lösung mit der kleineren Dichte  $n_1$  und setzen

$$S_0 = \frac{\hbar j_i}{\sqrt{n_1}}. \quad (4.78)$$

Die Integration der nichtlinearen Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + g|\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) + S(x, t) \quad (4.79)$$

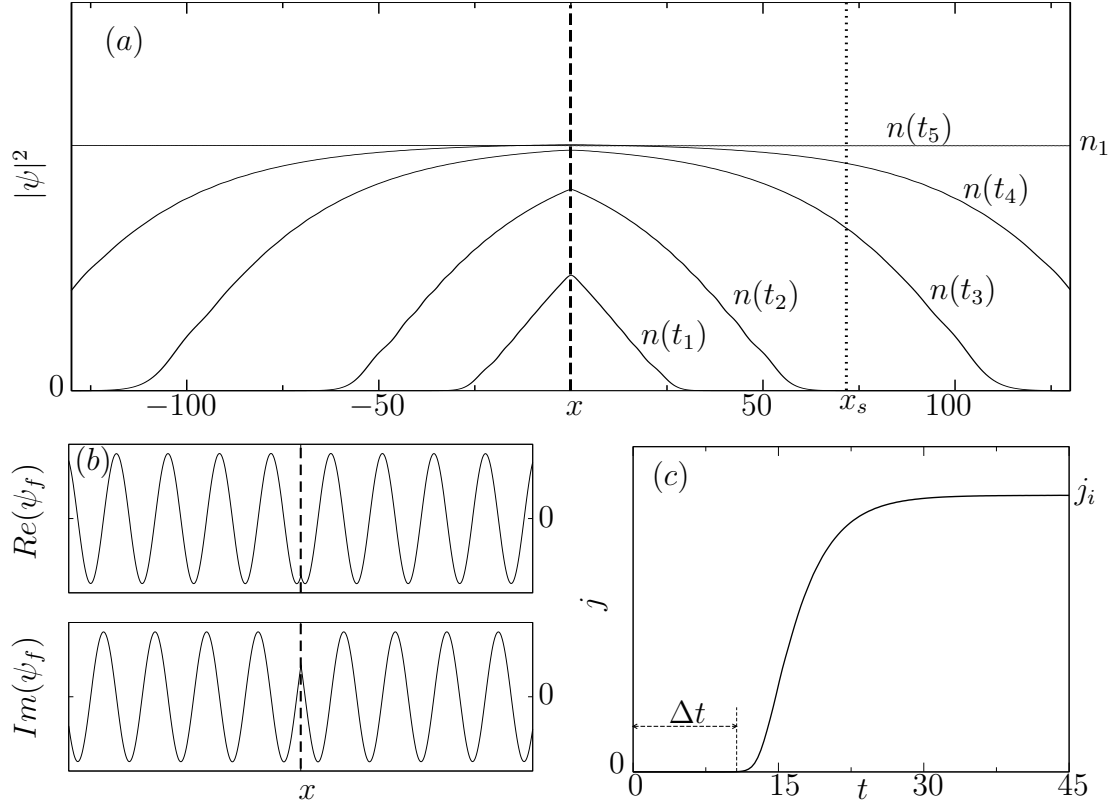
führen wir numerisch durch. Dazu entwickeln wir die Wellenfunktion auf einem numerischen Gitter und ihre Zeitentwicklung wird mittels eines impliziten Integrationsschemas simuliert (vgl. Abschnitt 6.2). Die nun zusätzlich benötigte Implementierung des Quellterms in den von uns verwendeten Gitterbasisansatz wird in Abschnitt 6.10 behandelt. Als Anfangsbedingung geben wir vor, dass der Wellenleiter kondensatfrei sei, d.h.  $\psi(x, t=0) \equiv 0$ . Konkret modellieren wir die Kopplungsstärke des Reservoirs an den Wellenleiter durch

$$S(x, t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ S_0 [1 - \exp(-t/T)], & t \geq 0 \end{cases} \quad \text{mit } T \gg \tau. \quad (4.80)$$

Die Funktion  $[1 - \exp(-t/T)]$  ist monoton steigend und garantiert im Limes  $t \rightarrow \infty$  eine rasche Konvergenz gegen den Grenzwert  $S_0$ ; um der Adiabatzitätsforderung genüge zu tun, wählen wir die charakteristische Zeit  $T$  sehr viel größer als die Periodizität  $\tau$ .

Da es unser Ziel ist, numerisch die Population eines von  $x = -\infty$  bis  $x = +\infty$  ausgedehnten monochromatischen Zustandes der Form  $\psi(x) = \sqrt{n_1} \exp(ik|x|)$  zu simulieren, müssen wir dafür Sorge tragen, dass artifizielle Rückreflexionen an den Rändern des endlichen Gitters vermieden werden. Dazu entwickeln wir in Abschnitt 6.9 spezielle *absorbierende Randbedingungen*, die wir an den Rändern des Gitters implementieren.

Ein Beispiel für die Evolution der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  wird in Abb.4.9(a) gezeigt, wobei die Amplitude der mittig positionierten Quelle gemäß der Funktion (4.80) adiabatisch zunimmt. Es wird die Dichte  $n$  zu fünf verschiedenen Zeitpunkten gezeigt: Kurz nach dem Einschalten ( $t = t_1$ ) der Quelle ist das Kondensat lokal um die Quelle zentriert, zu späteren Zeiten ( $t = t_2, t_3, t_4$ ) breitet sich das



**Abbildung 4.9:** Oben: Die mittig positionierte Quelle (gestrichelte Linie) emittiert symmetrisch eine monochromatische Materiewelle, wobei die Amplitude gemäß den Vorgaben (4.77) adiabatisch anwächst. Die Abbildung zeigt die Kondensatdichte  $|\psi|^2$  als Funktion des Ortes (in Einheiten der Wellenlänge  $2\pi/k$ ) zu fünf verschiedenen Zeiten ( $t_1 < t_2 \dots < t_5$ ); die Wellenfunktion konvergiert gegen eine ebene Welle  $\psi_f = \sqrt{n_1} \exp(ik|x|)$  mit konstanter Dichte  $n_1$ . Links unten: Real- und Imaginärteil des numerisch berechneten stationären Zustandes  $\psi_f$  zeigen, dass es sich bei  $\psi_f$  tatsächlich um eine ebene Welle handelt. Rechts unten: Zeitabhängigkeit des von der Quelle emittierten Stromes  $j$ , berechnet am Ort  $x_s$ . Sobald die Wellenfront zum Zeitpunkt  $t = \Delta t$  den Ort  $x_s$  erreicht, beginnt  $j(t)$  adiabatisch anzusteigen, um schließlich gegen den finalen Wert  $j_i$  zu konvergieren. (Die Zeit  $t$  ist in Einheiten  $2\pi\hbar/\mu$  gegeben).



Kondensat symmetrisch längs der Achse des Wellenleiters aus, um schließlich gegen einen stationären Zustand  $\psi_f$  mit konstanter Dichte  $n_1$  zu konvergieren (bei  $t = t_5$ ). Trägt man den Real- und Imaginärteil dieses stationären Zustandes separat auf (vgl. Abb.4.9(b)), so lässt sich nachprüfen, dass es sich bei  $\psi_f$  tatsächlich um eine ebene Welle der Form  $\sqrt{n_1} [\cos(k|x|) + i \sin(k|x|)]$  handelt; konkret geschieht das durch ein Anfitzen von Real- und Imaginärteil an die entsprechenden trigonometrischen Funktionen. Auf diese Weise können wir auch den zugehörigen Wellenvektor  $k$  bestimmen. Zusätzlich berechnen wir auch den von der Quelle emittierten Strom. Dazu werten wir den quantenmechanischen Stromoperator

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) - \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right) \quad (4.81)$$

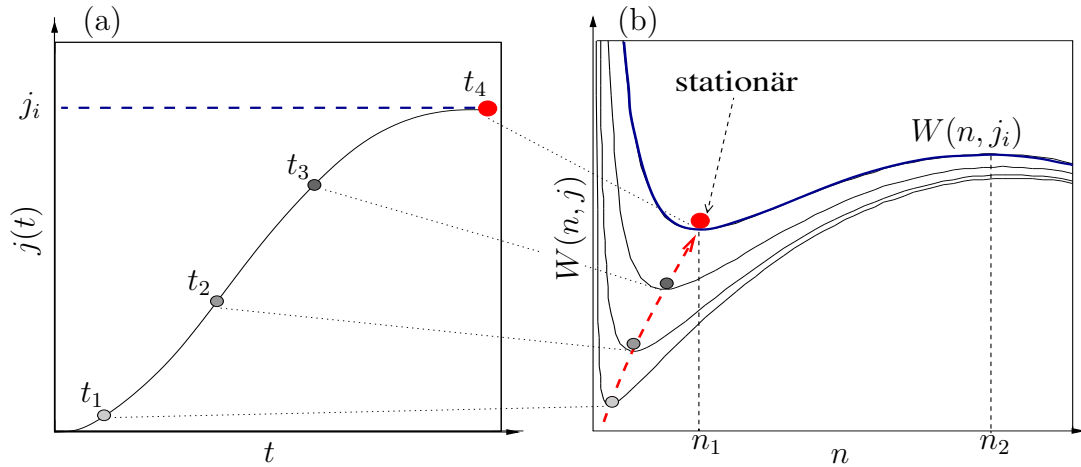
an einem Ort  $x_s$ , der sich rechts von der Position des Quellterms befinde, numerisch aus. Das Ergebnis einer solchen Rechnung zeigt Abb.4.9(c); wir stellen fest, dass  $j(t)$  nahezu 0 ist, bis das emittierte Kondensat zur Zeit  $t = \Delta t$  die den Ort  $x_s$  erreicht; für  $t > \Delta t$  steigt  $j(t)$  an um schließlich gegen den finalen Stromwert  $j_i$  zu konvergieren. Als Test für die Numerik, also um sicherzustellen, dass der numerisch gefundene stationäre Zustand wirklich eine Eigenmode der Gross-Pitaevskii-Gleichung darstellt, überprüfen wir, dass die Parameter  $\mu$ ,  $k$ ,  $n_1$  und  $j_i$  die Dispersionsrelation

$$\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_1 \quad \text{bzw.} \quad \mu = \frac{m j_i^2}{2n_1^2} + gn_1. \quad (4.82)$$

erfüllen. Da wir bei der Bestimmung der Quellstärke in (4.78) die Dichte  $n = n_1$  gesetzt haben, konvergiert das Verfahren gegen eine ebene Welle mit Dichte  $n_1$ .

Betrachten wir nun noch einmal die Gleichung (4.63); diese impliziert, dass für ein vorgegebenes  $S_0$  im Prinzip zwei Dichten, nämlich  $n_1$  und  $n_2$ , existieren, welche die Gleichung erfüllen. Wir stellen uns deswegen nun die Frage, ob bei dem von uns beschriebenen adiabatischen Einschaltvorgang immer ein stationärer Zustand mit Dichte  $n_1$  besetzt wird, oder ob auch eine Konvergenz gegen einen Zustand mit Dichte  $n_2$  möglich ist. Wir wollen dieser Frage nachgehen, indem wir nicht die Dichte  $n$ , sondern die Amplitude  $S_0$  vorgeben, wobei natürlich darauf zu achten ist, dass  $S_0$  der Ungleichung (4.64) genügt, um sicherzustellen, dass der gewünschte stationäre Zustand auch tatsächlich existiert. Nehmen wir also an, wir simulieren die Ankopplung eines anfänglich leeren Wellenleiters an ein Reservoir mit chemischen Potential  $\mu$  von wechselwirkenden Teilchen mit vorgegebenem Wechselwirkungsparameter  $g$ . Wird nun die Quellstärke  $S(x, t)$  gemäß der Vorgabe (4.77) adiabatisch erhöht, so nimmt der von der Quelle emittierte Strom  $j(t)$  gemäß der in Abb.4.10(a) langsam zu. Da die Zunahme des Stromes adiabatisch erfolgt, können wir parallel dazu die adiabatische Änderung des klassischen Potentials

$$W(n, j) = \frac{m j^2}{2n} + \mu n - \frac{1}{2} g n^2 \quad (4.83)$$



**Abbildung 4.10:** Links: Adiabatisches Anwachsen des von der Quelle emittierten Teilchenstromes als Funktion der Zeit. Rechts: Adiabatische Änderung des klassischen Potentials  $W(n)$  (4.83). Wird die Quellstärke adiabatisch erhöht, so wird von der Quelle eine ebene Welle mit langsam veränderlicher Dichte  $n_1$  emittiert. Man sieht deutlich die Konvergenz von  $W(n)$  gegen ein klassisches Potential (blau eingezeichnet), das zu dem finalen Strom  $j_i$  gehört.

verfolgen (vgl. Abschnitt 3.3.3). Die Dichte  $n_1$  des Potentialminimums  $W(n)$  hängt bei diesem adiabatischen Vorgang parametrisch von der Zeit ab,  $n_1 = n_1(t)$ . Abb.4.10(b) zeigt den Verlauf von  $W(n, j)$  zu vier verschiedenen Zeiten  $[t_1, \dots, t_4]$ , und somit für vier verschiedene Werte des emittierten Stromes  $j(t)$ . Da kurz nach dem Einschalten der Quelle (zur Zeit  $t = t_1$ ) ein sehr kleiner Strom emittiert wird, ist die Kondensatdichte in der Nähe der Quelle viel kleiner als  $n_2$ . Daher wird mit Sicherheit ein Zustand populiert, dessen Dichte nahe bei der Dichte  $n_1$  ist. Wenn man nun die Quellstärke  $S(x, t)$  nicht mehr erhöhen würde und die zeitliche Evolution mit  $S(x, t) = S(t_1)$  für  $t > t_1$  fortsetzen würde, so könnten wir damit exakt die ebene Welle  $\sqrt{n_1(t_1)} \exp(ik|x|)$  populieren. Fahren wir aber mit der adiabatischen Erhöhung von  $S(x, t)$  und somit von  $j(t)$  fort, so entwickelt sich das klassische Potential  $W(n, j)$ , wie in Abb.4.10(b) dargestellt, bis es schließlich im Grenzfall  $j(t) \rightarrow j_i$  gegen die stationäre Konfiguration  $W(n, j_i)$  (blaue Kurve) konvergiert, die dem gewünschten Zustand  $\psi_f(x) = \sqrt{n_1} \exp(ik|x|)$  entspricht.

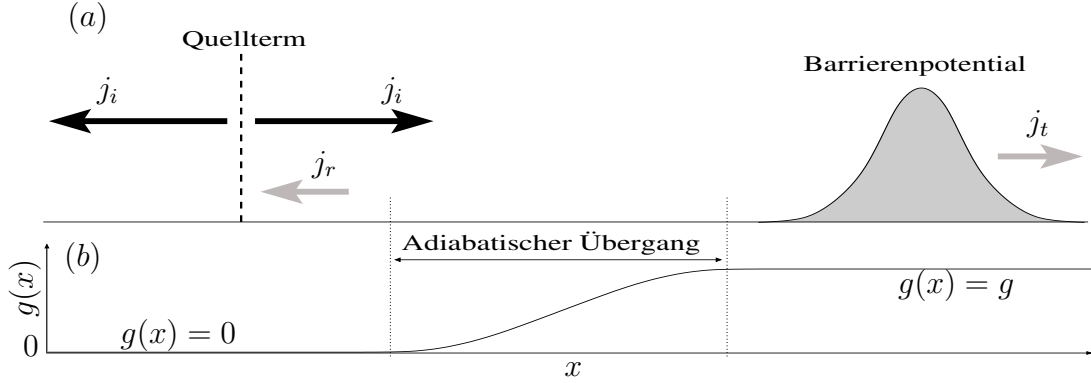
Dieses Gedankenexperiment verdeutlicht sehr anschaulich, dass die von uns entwickelte Methode einer adiabatischen Erhöhung der Quellstärke  $S(x, t)$  auch im nichtlinearen Fall ( $g > 0$ ) gegen eine ebene Welle, welche die Dispersionsrelation der Gross-Pitaevskii-Gleichung erfüllt, konvergiert. Zudem erklärt diese Betrachtungsweise auch, dass damit lediglich eine stationäre ebene Welle mit Teilchendichte  $n_1$  populiert werden kann, da der Kondensatzustand dem lokalem Minimum des klassischen Potentials  $W(n, j)$  adiabatisch folgt.

Da die in diesem Abschnitt betrachtete zeitabhängige Emission von Materiewellen in einen anfänglich leeren Wellenleiter einen realistischen Transportprozess beschreibt, können wir annehmen, dass auch in einem realen Transportexperiment, in dem ein Wellenleiter graduell mit Bose-Einstein-Kondensat gefüllt wird, der stromtragende Zustand mit der kleineren Kondensatdichte  $n_1$  besetzt wird.

### 4.3.3 Streuprozesse an einem Barrierenpotential

Wir untersuchen nun die Streuung eines Bose-Einstein-Kondensats an einem Barrierenpotential, das sich im Wellenleiter befindet. In Abschnitt 4.2.5 haben wir gezeigt, dass sich für einen gegebenen einfallenden Strom  $j_i$  im Prinzip alle zugehörigen stationären Streumoden finden lassen, indem die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung von der Downstream- zur Upstream-Region integriert wird. Eine systematische Variation der Integrationsanfangsbedingungen, in diesem Fall des transmittierten Stromes  $j_t$  in der Downstream-Region, erlaubt es, die gesuchten stationären Zustände zu identifizieren. Diese Vorgehensweise hat aber keine Aussagekraft über die dynamischen Stabilitätseigenschaften; letztere sind aber von entscheidender Bedeutung, wenn wir Aussagen darüber machen wollen, ob in einem anfangs leeren Wellenleiter diese stationären Zustände mittels einer einfallenden monochromatischen Materiewelle besetzt werden können. Hier zeigt sich der große Vorteil, welcher der Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Quellterm innewohnt: Für den Fall, dass diese Integration gegen einen stationären Streuzustand konvergiert, wissen wir automatisch, dass dieser Zustand dynamisch stabil ist (anderenfalls würden kleine numerische Fehler exponentiell mit der Zeit anwachsen und zu einer zeitabhängigen Dynamik führen).

Wir betrachten dazu im Folgenden die in Abb.4.11(a) gezeigte Anordnung: Links von einem Barrierenpotential befindet sich der Quellterm, von dem eine monochromatische Materiewelle mit Stromstärke  $j_i$  emittiert wird. Da die Materiewelle an der Barriere partiell reflektiert wird, fließt eine reflektierte Stromkomponente  $j_r$  nach links und somit auch an der Position der Quelle vorbei. Um nichtlineare Rückkopplungen der reflektierten Komponente auf den Quellterm zu vermeiden, gehen wir bei unseren numerischen Rechnungen folgendermaßen vor: Wir greifen dazu die grundlegende Idee aus Abschnitt 4.2.4 auf und lassen wieder eine Ortsabhängigkeit des Wechselwirkungsparameters  $g(x)$  gemäß den Vorgaben (4.40) zu;  $g(x)$  sei also in der Upstreamregion (dort wo sich die Quelle befindet) null und steige dann adiabatisch auf einen finalen Wert  $g(x) = g$  an (vgl. Abb.4.11(a)). Damit gilt am Ort, wo sich die Quelle befindet, das lineare Superpositionsprinzip und die rückreflektierte Materiewellenkomponente passiert den Bereich, an dem der Wellenleiter an das Reservoir angekoppelt ist, wechselwirkungsfrei. Durch die adiabatische Variation von  $g(x)$  erreichen wir, dass am effektiven Potential  $g(x)n(x)$  keine Rückreflexion stattfindet und somit für den Fall  $V(x) \equiv 0$  der



**Abbildung 4.11:** Schematische Darstellung einer Anordnung zur Simulation von Transportprozessen durch einen Wellenleiter mit Barrierenpotential. Die Quelle emittiert einen wohldefinierten Strom  $j_i$ , welcher partiell an der Barriere reflektiert wird. Um artifizielle nichtlineare Rückkopplungseffekte zwischen der Quelle und der reflektierten Wellenkomponente zu vermeiden, ist die Quelle in einem Gebiet mit  $g = 0$  positioniert. Der Wechselwirkungsparameter  $g(x)$  wird vor der Barriere adiabatisch bis zu einem gewünschten Wert erhöht. Der Verlauf von  $g(x)$  ist im unteren Teil der Abbildung aufgetragen.

bereits in Abschnitt 4.2.4 eingeführte stationäre adiabatische Zustand

$$\psi_{ad}(x) = \sqrt{n_1(x)} \exp \left[ i \int_{x_0}^x \kappa(\tilde{x}) d\tilde{x} \right] \quad (4.84)$$

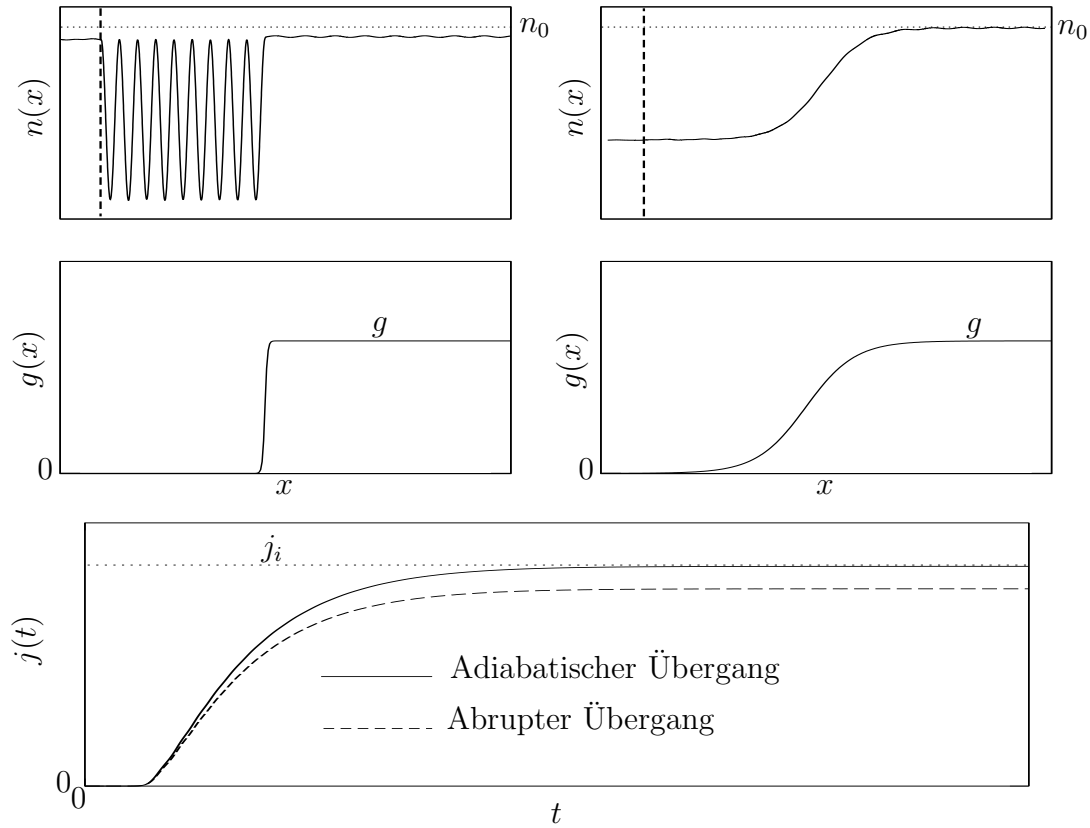
besetzt wird. Ein geeigneter Verlauf für  $g(x)$  ist in Abb.4.11(b) gezeigt. Dieser Zustand soll den konstanten Strom  $j_i = \hbar n_1(x) \kappa(x) / m$  tragen (d.h.  $n_1(x) \kappa(x) = \text{const}$ ). Für unsere numerischen Rechnungen modellieren wir die Ortsabhängigkeit der Wechselwirkungsstärke durch die Funktion

$$g(x) = \frac{g}{2} \tanh \left[ \left( \frac{x}{2x_{ad}} \right) + 1 \right]. \quad (4.85)$$

Da der Quellterm im Bereich verschwindender Wechselwirkung  $g$  positioniert sei, ist die zur Bestimmung der Quellstärke  $S_0$  (4.78) benötigte Dichte einfach durch  $n_1 = j_i \sqrt{m/2\mu}$  gegeben. Damit finden wir

$$S_0 = \hbar \left( \frac{2\mu j_i^2}{m} \right). \quad (4.86)$$

Abb.4.12 zeigt die Dichte von zwei stationären Zuständen, die durch die Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Quellterm gefunden wurden. In der linken Hälfte der Abbildung wird evident, dass eine nichtadiabatische Änderung von  $g(x)$  zu unerwünschten Rückreflexionen führt, wohingegen



**Abbildung 4.12:** Skizziert sind zwei verschiedene Übergänge zwischen dem linearen und nichtlinearen Bereich. Wird  $g(x)$  instantan von null auf einen Maximalwert angehoben (links), so kommt es zu ungewollten Rückreflexionen an der durch das effektive Potential  $gn$  induzierten Potentialschwelle. Bei einer adiabatischen Änderung von  $g(x)$  werden diese Reflexionen vermieden. Der untere Teil der Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf des am rechten Rand des numerischen Gitters gefundenen Stromes. Nur bei einem adiabatischen Übergang wird der gewünschte Strom  $j_i$  erreicht.

in der rechten Hälfte der Fall eines adiabatischen Übergangs vom wechselwirkenden zum nicht-wechselwirkenden Bereich gezeigt wird. Die untere Hälfte der Abbildung zeigt den Strom  $j(t)$  als Funktion der Zeit, der durch den Wellenleiter transmittiert wird. Nur im Falle eines adiabatischen Übergangs der Wechselwirkungsstärke  $g(x)$  wird ein stationärer Zustand besetzt, der den gewünschten Strom  $j_i$  trägt. (Konkret berechnen wir den Strom  $j(t)$ , den ein numerisch generierter Zustand trägt, indem wir den quantenmechanischen Stromoperator zu jedem gewünschten Zeitpunkt am rechten Ende des numerischen Gitters auswerten).

Haben wir durch numerische Testrechnungen einen geeigneten Wert für den Parameter  $x_{ad}$  gefunden (typischerweise ist  $x_{ad} \geq 10\lambda$ , wobei  $\lambda$  die Wellenlänge der ebenen Welle im linearen Bereich ist), so dass am Übergang vom linearen zum

nicht-linearen Bereich keine ungewollten Rückreflexionen auftreten, so können wir nun Streumoden in einem Wellenleiter mit zusätzlichem Barrierenpotential  $V(x)$  betrachten:

Wir integrieren nun also numerisch die Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + g|\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) + S(x, t) \quad (4.87)$$

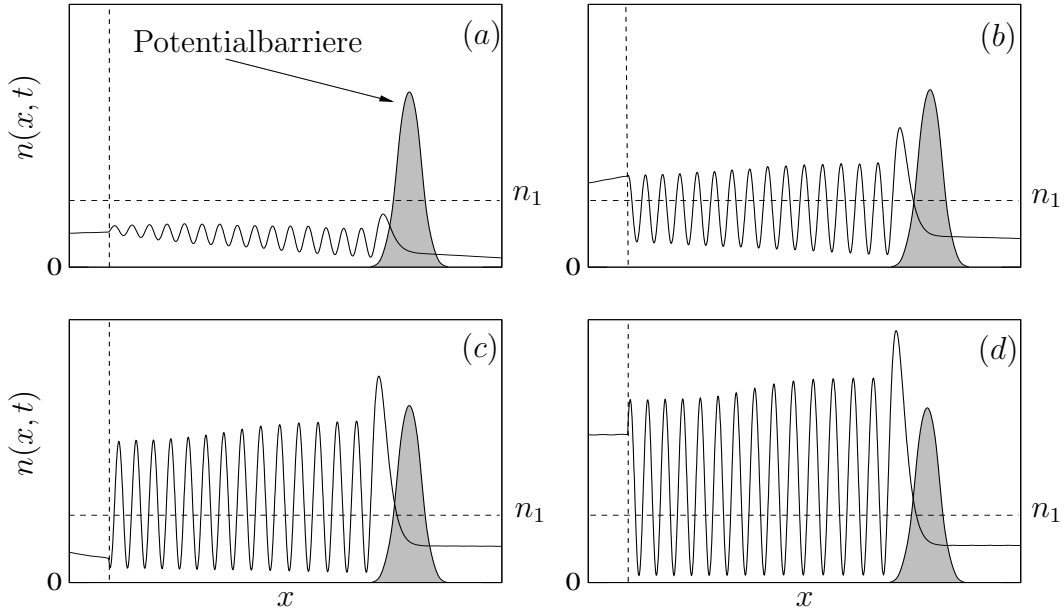
mit der Anfangsbedingung  $\psi(x, t = 0) \equiv 0$  und simulieren damit einen zeitabhängigen Transportprozess, bei dem in einen anfänglich leeren Wellenleiter Kondensat injiziert wird. Für das Potential  $V(x)$  nehmen wir im folgenden Beispiel eine Gaußförmige Barriere mit Breite  $\sigma$  an

$$V(x) = V_0 \exp(-x^2/\sigma^2). \quad (4.88)$$

Abb.4.13 zeigt in einer Sequenz von vier Teilbildern die zeitliche Evolution der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  die am Barrierenpotential (4.88) gestreut wird. Kurz nach dem Einschalten (vgl. Teilbild (a)) ist die Dichte des Kondensats noch sehr klein im Vergleich zur Dichte  $n_1$ ; die Dichteoszillationen zwischen Quelle und Barriere zeigen, dass das Kondensat an der Barriere partiell reflektiert wird. Auf den Teilbildern (b) und (c) ist das Konvergieren der Wellenfunktion gegen den finalen stationären Zustand  $\psi_f(x)$ , der in Teilbild (d) gezeigt ist, zu sehen. Indem wir den Zustand  $\psi_f(x)$  in die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung einsetzen und feststellen, dass  $\psi_f(x)$  diese Differentialgleichung löst, ist explizit nachgeprüft, dass das Integrationsverfahren gegen eine Lösung der stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung konvergiert. Die Dichte dieses Stationären Zustandes in Teilbild (d) ist in der Downstream-Region rechts der Barriere konstant, da dort die Wellenfunktion von der Form  $\sqrt{n_d} \exp(ikx)$  ist. Dabei ist  $n_d$  die Dichte der nach rechts auslaufenden ebenen Welle. Natürlicherweise gilt  $n_d < n_1$ , da aufgrund der Rückreflexion an der Barriere nun weniger Kondensat in die Downstream-Region gelangt, als in einem uniformen Wellenleiter ohne Streupotential ( $n_1$  ist ja bekanntlich die Dichte der Überschalllösung im uniformen Wellenleiter). Zwischen Barriere und Quellterm finden wir starke Dichteoszillationen, die auf die partielle Rückreflexion des Kondensats zurückzuführen sind. Da die Wechselwirkungsstärke  $g(x)$  zwischen Quellterm und Potential adiabatisch von null zu einem Maximalwert  $g(x) = g = \text{const}$  variiert wird, nimmt die Höhe der Maxima dieser Dichteoszillationen von links nach rechts adiabatisch zu. Links von der Quelle kommt es zur Überlagerung der von der Barriere reflektierten und der von der Quelle nach links emittierten Materiewelle.

Dass die Dichte in diesem Bereich konstant ist, können wir leicht einsehen, indem wir die Wellenfunktion in diesem Bereich betrachten. Da dort  $g(x) = 0$  ist, hat die Wellenfunktion die Form

$$\psi(x) = A e^{-ikx} + B e^{-ikx+i\theta}. \quad (4.89)$$



**Abbildung 4.13:** Streuung eines von der Quelle emittierten Bose-Einstein-Kondensates an einer Barriere. Gezeigt sind vier Momentaufnahmen der Zeitentwicklung der Kondensatdichte  $n(x, t)$ . Man sieht deutlich die Konvergenz von  $n(x, t)$  gegen einen stationären Streuzustand, der in Teilabbildung (d) gezeigt ist.

Hierbei ist  $\theta$  eine Phasenverschiebung der reflektierten Materiewelle. Wir berechnen die Dichte  $|\psi(x)|^2$  dieser Wellenfunktion und finden

$$|\psi(x)|^2 = A^2 + B^2 + 2AB \cos \phi = \text{const.} \quad (4.90)$$

Dies ist eine Konstante, deren Wert von der Streuphase  $\theta$  abhängt. Der nach links propagierende Strom  $j_{links}$  kann mittels des quantenmechanischen Stromoperators berechnet werden; man findet nach kurzer Rechnung

$$j_{links} = -\frac{\hbar k}{2m} (A^2 + B^2 + 2AB \cos \theta), \quad \text{mit } k = \sqrt{2m\mu}/\hbar. \quad (4.91)$$

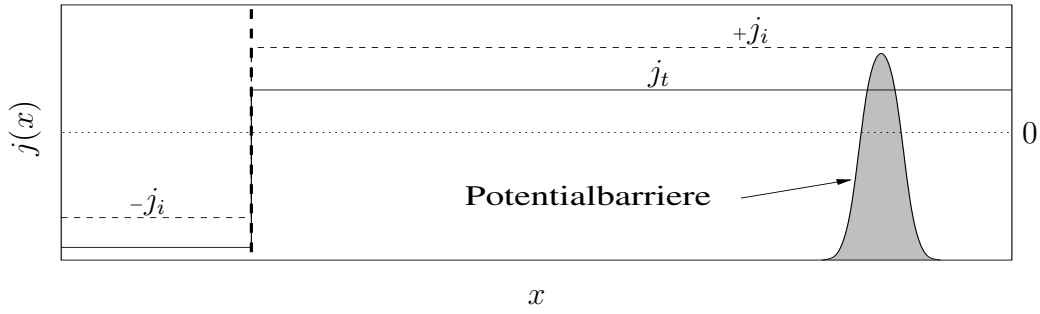
Rechts des Quellterms ist die Wellenfunktion im wechselwirkungsfreien Bereich durch

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx+i\theta} \quad (4.92)$$

gegeben. Damit finden wir für den nach rechts propagierenden Gesamtstrom  $j_{rechts}$

$$j_{rechts} = -\frac{\hbar k}{2m} (A^2 - B^2), \quad \text{mit } k = \sqrt{2m\mu}/\hbar. \quad (4.93)$$

Dieser Strom ist gleich dem transmittierten Strom  $j_t$  in der Downstream-Region.



**Abbildung 4.14:** Numerisch errechneter Strom  $j_t$  eines stationären Streuzustandes als Funktion des Ortes  $x$  entlang des Wellenleiters. Wie erwartet, ist der Strom rechts der Quelle überall konstant;  $j_t$  ist kleiner als der von der Quelle emittierte Strom  $j_i$ , da die Barriere das Kondensat partiell reflektiert (die Quelle ist bei der gestrichelten Vertikalen positioniert).

Im Allgemeinen berechnen wir die relevanten Ströme durch numerisches Auswerten des quantenmechanischen Stromoperators

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \right]. \quad (4.94)$$

Damit können wir den Strom der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  zu jeder beliebigen Zeit an jedem gewünschten Ort errechnen. Wir interessieren uns für den Strom, der stationäre Wellenfunktion, deren Dichte in Abb.4.14(d) gezeigt ist. Wie erwartet finden wir, dass  $j(x)$  rechts von der Quelle einen für alle Orte  $x$  konstanten Wert  $j(x) = j_t$  annimmt. Nur in dem Bereich wo  $g(x) = 0$  gilt, können wir  $j_t$  gemäß  $j_i = j_t + j_r$  in eine einfallende und reflektierte Stromkomponente aufteilen.

Wir haben nun einen numerischen Algorithmus zur Hand, der die Injektion einer monochromatischen Materiewelle in einen anfänglich leeren Wellenleiter simuliert und mittels Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung die Zeitentwicklung der Kondensatwellenfunktion beschreibt. Somit wird ein zeitabhängiger Transportprozess auf dem Niveau der Mean-Field Theorie für wechselwirkende Bose-Einstein Kondensate simuliert. Die hier entwickelte Methode zur Simulation von Transportprozessen macht es auch möglich, zu untersuchen, ob von der Kondensatwellenfunktion - wie im obigen Beispiel - ein stationärer Streuzustand besetzt wird, oder ob der Transportprozess für alle Zeiten  $t > 0$  von einer zeitlichen Dynamik dominiert wird.

#### 4.3.4 Berechnung von Transmissionen

In den vorhergehenden Abschnitten haben wir ein Verfahren eingeführt, das es erlaubt zeitabhängige Transportprozesse in Wellenleitergeometrien zu simulieren



und die Fragestellung, ob ein stationärer Streuzustand populiert wird, zu untersuchen. Wir zeigen nun, dass diese Methode einen direkten Zugang zur Berechnung von Transmissions- und Reflexionskoeffizienten insbesondere auch für den nichtlinearen Fall  $g > 0$  ermöglicht.

Betrachten wir zunächst den Fall, in dem der zeitabhängige Transportprozess in einem Wellenleiter mit Barrierenpotential  $V(x)$  gegen einen stationären Streuzustand  $\psi_f(x)$  konvergiert. Wenn wir für dieses Szenario den zeitlichen Verlauf des durch den Wellenleiter fließenden Stroms  $j(t)$  betrachten, so konvergiert dieser gegen einen stationären Wert  $j_t$ ; das ist der wohldefinierte Strom, der in die Downstream-Region transmittiert wird, wenn der stationäre Streuzustand  $\psi_f(x)$  populiert ist. Ebenfalls wohldefiniert ist der von der Quelle emittierte Teilchenstrom  $j_i$ , der in Abwesenheit des Barrierenpotentials  $V(x)$  durch den Wellenleiter fließt. Für einen stationären Streuzustand  $\psi_f(x)$  definieren wir die Transmission  $T$  also durch

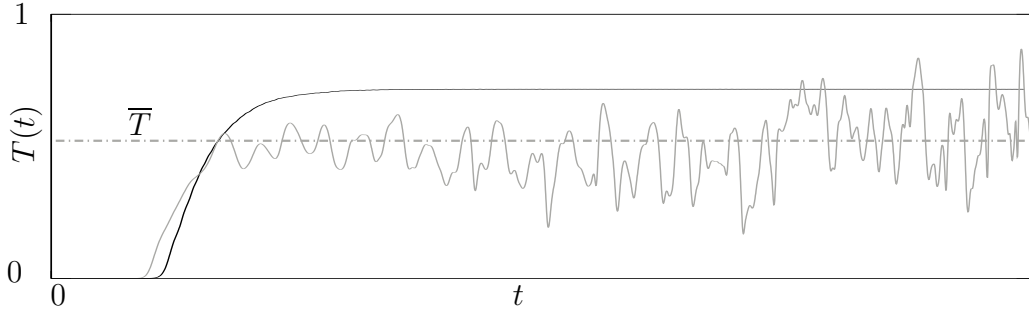
$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{\text{Strom durch Wellenleiter **mit** Barriere}}{\text{Strom durch Wellenleiter **ohne** Barriere}}. \quad (4.95)$$

Für  $g = 0$  ist diese Definition äquivalent zur üblichen Definition der Transmission in der linearen Quantenmechanik, unser Ansatz stellt aber zugleich eine natürliche Erweiterung zur Berechnung von Transmissionswerten im nichtlinearen Fall dar. Die Definition (4.95) ist für zeitunabhängige Streuzustände äquivalent zur in Abschnitt 4.2.4 über einen adiabatischen Übergang des Wechselwirkungsparameters  $g$  eingeführten Transmissionsdefinition.

Eine weitere konzeptionelle Schwierigkeit besteht darin, dass im nichtlinearen Regime die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  aufgrund von dynamischen Instabilitäten nicht immer gegen einen stationären Streuzustand konvergiert, sondern unter Umständen zeitabhängig bleibt; solch eine zeitabhängige Dynamik ist zum Beispiel bei Transportprozessen durch Unordnungspotentiale von Relevanz (vgl. Abschnitt 5.3). In diesem Falle können wir natürlich keinen stationären transmittierten Strom angeben, stattdessen berechnen wir mittels des quantenmechanischen Stromoperators den orts- und zeitabhängigen Strom  $j(x, t)$  der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$ . Wir können nun einen Ort  $x_s$  in der Downstream-Region wählen, an dem wir den Strom  $j(x_s, t)$  messen. Misst man den Strom zum Beispiel an zwei verschiedenen Orten  $x_s$  und  $x'_s$  in der Downstream-Region, so erhält man zwei gleich aussehende zeitliche Stromverläufe  $j(x_s, t)$  bzw.  $j(x'_s, t)$ , die um das Zeitintervall  $\Delta\tau = (x_s - x'_s)/v$  verschoben sind;  $v$  ist die Geschwindigkeit des Kondensats. Damit können wir eine zeitabhängige Transmission  $T(t)$  einführen

$$T(t) = \frac{j_t(x_s, t)}{j_i} \quad (4.96)$$

( $j_i$  ist der zeitunabhängige, von der Quelle emittierte Strom). Abb.4.15 illu-



**Abbildung 4.15:** Gezeigt ist die Transmission  $T(t)$  als Funktion der Zeit. Konvergiert  $\psi(x, t)$  gegen einen stationären Zustand  $\psi_f(x)$ , so konvergiert  $T(t)$  nach dem Einschaltvorgang gegen einen stationären Wert, den wir als Transmission des stationären Streuzustandes bezeichnen (schwarze Kurve). Bleibt  $\psi(x, t)$  zeitabhängig, so gilt die auch für die Transmission (graue Kurve). In letzterem Fall charakterisieren wir die Transmissionseigenschaften des Wellenleiters durch den zeitlichen Mittelwert  $\bar{T}$  der Transmission (gestrichelte Linie).

striert die beiden möglichen Szenarien. Wir tragen dazu  $T(t)$  in Abhängigkeit von der Zeit auf; den dafür benötigten transmittierten Strom berechnen wir mittels des Stromoperators (4.94). Gezeigt sind zwei typische Verläufe für  $T(t)$ : Beide Kurven beginnen zur Zeit  $t = 0$  wegen der Anfangsbedingung  $\psi(x, t = 0) \equiv 0$  am Ursprung, also bei  $T(t = 0) = 0$ . Die Werte für die Transmission beginnen schnell anzusteigen, sobald das Kondensat die Downstream-Region erreicht hat. Die schwarze Kurve zeigt den Fall, dass  $\psi(x, t)$  gegen einen stationären Zustand  $\psi_f(x)$  konvergiert. Da dann der transmittierte Strom  $j_t$  stationär wird, ist der Transmissionswert konstant. Die graue Kurve zeigt ein Beispiel für den Fall, dass  $\psi(x, t)$  für alle Zeiten  $t$  zeitabhängig bleibt; damit bleibt natürlich auch die Transmission zu allen Zeiten  $t$  einer zeitlichen Dynamik unterworfen. Um nun dennoch auch in diesem Fall eine geeignete Größe zur Charakterisierung der Transporteigenschaften eines Wellenleiters und des Barrierenpotentials angeben zu können, berechnen wir den zeitlichen Mittelwert der Transmission

$$\bar{T} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} T(t') dt' , \quad (t > 0) . \quad (4.97)$$

Der Mittelwert  $\bar{T}$ , der genau den über die Zeit integrierten Fluss repräsentiert, ist geeignet, Transporteigenschaften zu charakterisieren, da er auch experimentell zugänglich ist: Die Anzahl der Atome  $\mathcal{N}_A$ , die während eines wohldefinierten Zeitintervalls  $\tau$  von der Upstream-Region aus die Downstream-Region erreichen, ist durch  $\mathcal{N}_A = \tau \bar{T} j_i$  gegeben. Diese Anzahl der Atome kann nun aber experimentell, zum Beispiel durch Absorptionsspektroskopie, gemessen werden; somit kann bei bekanntem einfallende Strom  $j_i$  der Wert  $\bar{T}$  bestimmt werden.

Idealerweise sollte der zeitliche Mittelwert  $\bar{T}$  für unendlich lange Zeitintervall-

le berechnet werden; dies kann numerisch natürlich nicht durchgeführt werden. Wir überprüfen aber in unseren numerischen Rechnungen, dass der Mittelwert unverändert bleibt, wenn wir das Zeitintervall  $\tau$  durch  $2\tau$  und  $3\tau$  ersetzen. Damit ist sichergestellt, dass das *Mittelungsfenster*  $\tau$  ausreichend groß gewählt wird.

### 4.3.5 Transport in dreidimensionalen Wellenleitergeometrien

Bisher haben wir in diesem Kapitel nur quasi-eindimensionale Wellenleitersysteme behandelt. In diesem Abschnitt erläutern wir, wie die bisher entwickelte numerische Methode zur Simulation von Transportprozessen auf höherdimensionale Wellenleiter erweitert werden kann. Exemplarisch wollen wir hier unsere Überlegungen an einem zweidimensionalen Wellenleiter (in kartesischen Koordinaten  $x, y$ ) ausführen; (der ebenfalls wichtige Fall eines dreidimensionalen zylindersymmetrischen Wellenleiters wird in Anhang 8.1 behandelt). Wir betrachten also nun die zweidimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung mit einem modifizierten Quellterm

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) + U_0 |\Psi(x, y, t)|^2 \right] \Psi(x, y, t) + S_0 \delta(x - x_0) e^{-i\mu t/\hbar} F(y), \quad (4.98)$$

wobei die Bedeutung des Faktors  $F(y)$  im Folgenden noch zu klären sein wird. Die Longitudinalachse wird wie bisher wieder mit  $x$  bezeichnet.

Betrachten wir zunächst den Fall eines uniformen Wellenleiters, d.h. das externe Potential ist unabhängig von  $x$ ; wir können darum schreiben,  $V(x, y) \equiv V(y)$ . Eine spezielle Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.98) lässt sich in diesem Fall durch den Separationsansatz

$$\Psi(x, y, t) = \psi(x) \phi(y) e^{-i\mu t/\hbar} \quad (4.99)$$

finden, wobei  $\phi(y)$  als eine auf eins normierte transversale Mode des Wellenleiters angenommen werde, das heißt, es gilt

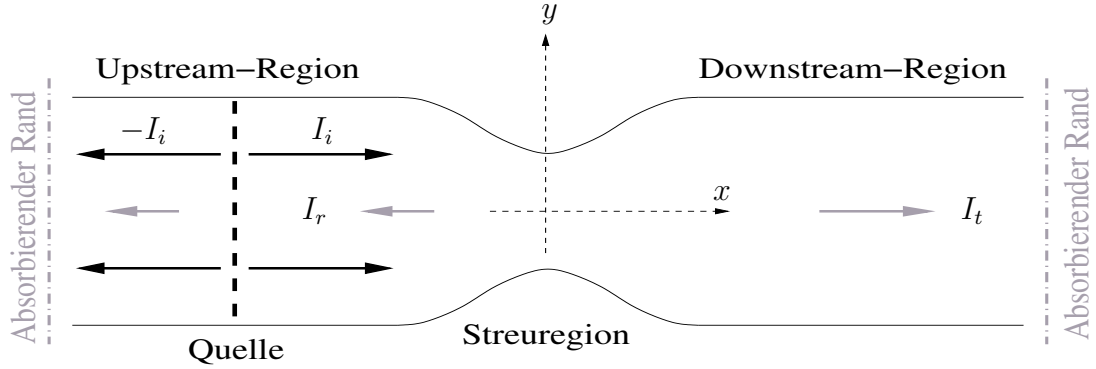
$$H_{tr} \phi(y) = \epsilon (|\psi(x)|^2) \phi(y),$$

mit

$$H_{tr} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(y) + U_0 |\psi(x)|^2 |\phi(y)|^2 \right] \quad (4.100)$$

(vgl. Abschnitt 3.2.1). Der Ansatz (4.99) ist dann eine exakte Lösung der Wellengleichung, wenn  $|\psi(x)|^2 = \text{const}$  ist, also die longitudinale Dichte  $n$  (3.23) entlang der  $x$ -Achse nicht variiert, da dann die Kommutatorrelation

$$\left[ H_{tr}, \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] = 0 \quad (4.101)$$



**Abbildung 4.16:** Schema zur Implementierung des Quellterms in einem zweidimensionalen Wellenleiter. Die Quelle ist in der Upstream-Region positioniert und emittiert nach links und rechts eine ebene Welle der Form (4.105), die den Strom  $I_i$  trägt. An der Streuregion wird sie partiell reflektiert, so dass der Strom  $I_t$  in die Downstream-Region transmittiert wird. An den Rändern des numerischen Gitters verhindern absorbierende Ränder ungewollte Rückreflexionen.

erfüllt wird. Mit (4.100) nimmt die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.98) die einfache Form

$$\mu \psi(x)\phi(y) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \epsilon(n)\psi(x) \right] \phi(y) + S_0 \delta(x - x_0) F(y),$$

mit  $n = |\psi(x)|^2 = \text{const}$  (4.102)

an. Setzen wir in (4.102) nun  $F(y) = \phi(y)$  so finden wir mit den Methoden aus Abschnitt 4.3.1 die stationäre Lösung

$$\psi(x) = S_0 \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2[\mu - \epsilon(n)]}} \exp \left[ i \sqrt{2m[\mu - \epsilon(n)]} |x - x_0| / \hbar \right] \phi(y), \quad (4.103)$$

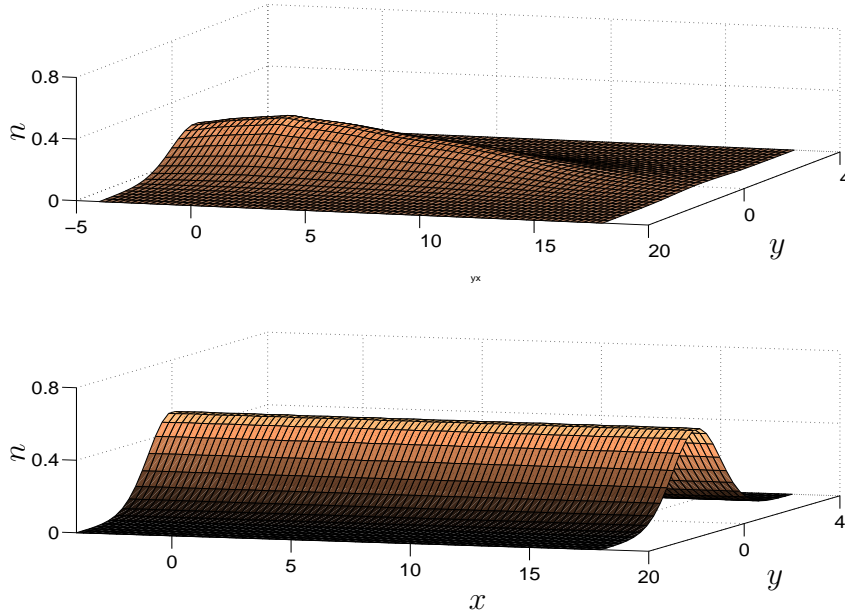
deren longitudinale Dichte für alle Orte  $x$  konstant ist. Wir implementieren daher einen zusätzlich von der Transversalkoordinate  $y$  abhängigen Quellterm der Form

$$S(x, y, t) = S_0 f(t) \phi(y) \delta(x - x_s), \quad (4.104)$$

in die Gross-Pitaevskii-Gleichung, um damit die Ankopplung des Wellenleiters an ein Reservoir zu simulieren. Indem wir der Quelle das Profil der Transversalmode  $\phi(y)$  aufprägen, simulieren wir eine einfallende Materiewelle von der Form

$$\psi_i(x, y, t) = \sqrt{n} e^{ikx} \phi(y) \quad (4.105)$$

wobei  $n$  die konstante longitudinale Dichte der von der Quelle emittierten Materiewelle ist. Wir illustrieren dies in Abb.4.16: Der Quellterm befindet sich in der Upstream-Region und emittiert eine Materiewelle der Form (4.105), die an der



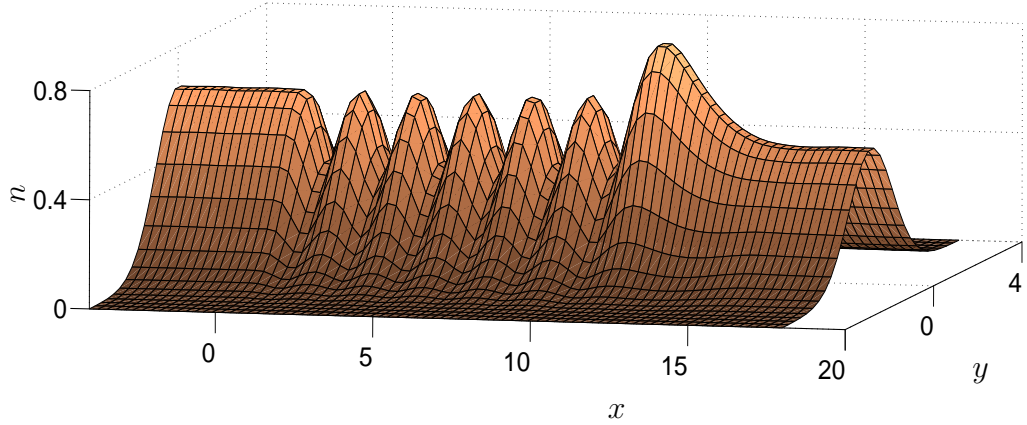
**Abbildung 4.17:** Oben: Dichte  $n = |\psi(x, y, t)|^2$  der Kondensatwellenfunktion kurz nach dem Einschalten der Quelle. Unten: Dichte des finalen stationären Zustandes (4.105). Die Quelle ist bei  $x = 0$  positioniert.

Streueregion partiell reflektiert wird. Um an den Rändern des numerischen Gitters ungewollte Rückreflexionen zu vermeiden, implementieren wir dort wieder absorbierende Randbedingungen (vgl. Abschnitt 6.9).

Um nun wieder stationäre Zustände in solchen Wellenleitern zu bevölkern, erhöhen wir wieder adiabatisch, wie im Falle des quasi-eindimensionalen Wellenleiters, die Stärke des Quellterms und erhalten durch Integration der Gross-Pitaevskii-Gleichung die zeitliche Evolution der Wellenfunktion  $\psi(x, y, t)$ . Wir illustrieren dies am Beispiel eines Wellenleiters mit harmonischem Transversalpotential  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  und betrachten den Fall, dass es sich bei  $\phi(y)$  um die auf eins normierte transversale Grundmode handelt. In Abb.4.17 ist die Dichte  $|\psi(x, y, t)|^2$  kurz nach dem Einschalten der Quelle gezeigt (oberes Bild); das untere Bild zeigt die Dichte des stationären Zustands 4.105, gegen den  $\psi(x, y, t)$  konvergiert.

Befindet sich im Wellenleiter ein zusätzliches Streupotential, so können wir wieder - wenn sie existieren - stationäre Streuzustände populieren. Ein Exempel für so einen Streuzustand zeigt Abb.4.18. Hier wurde zusätzlich zum harmonischen Transversalpotential eine Gaußförmige Potentialbarriere der Form  $V(x) = V_0 \exp(-(x - x_b)^2/\sigma^2)$  angenommen (hier  $x_b = 13$ ). Der Quellterm ist bei  $x = 0$  positioniert.

Wir berechnen nun noch den von der Quelle emittierten Gesamtstrom  $I_i$ . Dazu



**Abbildung 4.18:** Stationärer Streuzustand in einem Wellenleiter mit Gaußförmiger Potentialbarriere bei  $x = 13$ , der Quellterm ist bei  $x = 0$  positioniert. Die Rückreflexion an der Barriere führt zu Dichteoszillationen zwischen der Position des Quellterms und dem Barrierenpotential. In der Downstream-Region wird die longitudinale Dichte konstant; das entspricht einer nach rechts transmittierten ebenen Welle von der Form  $\sim \exp(ikx)\phi(y)$ .

berechnen wir mittels des quantenmechanischen Stromdichteoperators

$$\vec{j}(x, y, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(x, t) \nabla \psi(x, y, t) - \psi(x, t) \nabla \psi^*(x, y, t)] \quad (4.106)$$

die zur Wellenfunktion (4.103) gehörende Teilchenstromdichte; man findet nach kurzer Rechnung

$$j_x(x, y, t) = \frac{S_0^2 \hbar^2}{\sqrt{8m^3}} \frac{1}{\sqrt{\mu - \epsilon(n)}} |\phi(y)|^2. \quad (4.107)$$

Den längs des Wellenleiters fließenden Teilchenstrom  $I$  finden wir durch die Integration

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dy j_x(x, y, t). \quad (4.108)$$

Da wir die Transversalmode  $\phi(y)$  als auf eins normiert angenommen haben, ist der von der Quelle emittierte Teilchenstrom durch

$$I_i = \frac{S_0^2 \hbar^2}{\sqrt{8m^3}} \frac{1}{\sqrt{\mu - \epsilon(n)}} \quad (4.109)$$

gegeben. Mittels numerischer Auswertung des Stromoperators (4.106) und des Integrals (4.108) können wir den transmittierten Strom  $I_t$  in der Downstream-Region bestimmen, und damit die Transmission von Streuzuständen gemäß den Betrachtungen in Abschnitt 4.3.4 mit  $T = I_t/I_i$  bestimmen.

---

Um der Vollständigkeit Rechnung zu tragen, sei hier noch erwähnt, dass es ebenso wie im quasi-eindimensionalen Fall sinnvoll ist, die Quelle in einem Bereich mit verschwindendem Wechselwirkungsparameter  $g$  zu positionieren, um ungewollte Rückkopplungen zwischen der Quelle und der rückreflektierten Wellenkomponente zu unterbinden. Der Übergang zwischen Wellenleitergebieten mit  $g = 0$  und  $g = \text{const} > 0$  muss natürlich wieder adiabatisch erfolgen.

# Kapitel 5

## Transport durch spezielle Potentialstrukturen

In diesem Kapitel bringen wir die Methoden zur Simulation von Transportprozessen und zur Berechnung von Transmissionen zur Anwendung und betrachten den Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch drei verschiedene Typen von mesoskopischen Potentialstrukturen. Alle drei Strukturen basieren auf einem zylindersymmetrischen Materiewellenleiter und wir wollen annehmen, dass die Wellenfunktion die Drehimpulsquantenzahl  $m_l = 0$  bezüglich der longitudinalen Achse des Wellenleiters hat. Wir schließen damit eine Rotation des Kondensats um das Zentrum des Wellenleiters aus.

Als erste einfache Anwendung betrachten wir zunächst einen Wellenleiter, der eine einzelne Barriere bzw. einen einzelnen Quantenpunktkontakt aufweist und berechnen nichtlineare Transmissionscharakteristiken. Im zweiten Teil des Kapitels wenden wir uns resonantem, nichtlinearem Transport durch ein Doppelbarrierenpotential zu und werden die Existenz von bistabilen Resonanzen aufzeigen; des Weiteren untersuchen wir, ob resonante Zustände in Anwesenheit einer Nichtlinearität besetzt werden können. Schließlich betrachten wir im dritten Teil den Transport durch das in Abschnitt 2.3 entwickelte magnetische Unordnungspotential. Wir werden dabei die Existenz von zeitabhängigen Transportprozessen aufzeigen und in diesem Kontext der Frage nachgehen, inwieweit das wohlbekannte Phänomen der Anderson-Lokalisierung für wechselwirkende Atome noch eine adäquate Beschreibung darstellt.

### 5.1 Transport durch Quantenpunktkontakte

Als erste Anwendung der in Kapitel 4 entwickelten Techniken untersuchen wir in den folgenden beiden Abschnitten Transport durch Quantenpunktkontakte, die



sich in einem radialsymmetrischen, harmonischen Wellenleiter befinden. Konkret betrachten wir zwei verschiedene Realisierungen von Quantenpunktkontakten: Zum einen lässt sich ein solcher Punktkontakt durch ein Gaußförmiges Barrierenpotential erzeugen, das durch einen blauverstimmten Laser generiert wird, der den Wellenleiter senkrecht kreuzt. In diesem Fall sieht das gesamte Potential, das auf die kalten Atome bzw das Kondensat wirkt, folgendermaßen aus (vgl. Abschnitt 2.2.2)

$$V_b(x, r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + V_0 \exp(-x^2/\sigma^2). \quad (5.1)$$

Der erste Term ist das Wellenleiterpotential, der zweite das Barrierenpotential. Der Parameter  $\sigma$  gibt die Breite der Potentialbarriere an,  $V_0$  ihre Höhe. Zum anderen untersuchen wir auch den Transport durch einen Quantenpunktkontakt der durch eine Variation der Transversalfrequenz  $\omega$  induziert wird. Gemäß den Betrachtungen in Abschnitt 2.2.2 ist das Gesamtpotential dann von der Form

$$V_q(x, r) = \frac{1}{2}m \left( \omega_0 + \delta\omega e^{-x^2/\sigma^2} \right)^2 r^2, \quad (5.2)$$

wobei wir hier in Anlehnung an eine frühere Arbeit von Thywissen [55] eine Gaußförmige Modulation des transversalen Einschlusspotentials annehmen. Anhand dieser beiden Beispiele werden wir im Folgenden exemplarisch nichtlineare Transmissionsspektren untersuchen.

### 5.1.1 Transmission durch eine Gaußförmige Barriere

Wir behandeln als erstes den Transport eines Kondensats von  $^{87}\text{Rb}$  Atomen (Masse  $m = 1.45 \times 10^{-25} \text{ kg}$ , s-Wellenstreuungslänge  $a_s = 5.77 \text{ nm}$ ) durch eine Gaußförmige Barriere, das heißt, wir betrachten das Potential (5.1). Für unsere numerischen Rechnung wählen wir Parameter, die auch experimentell relevant sein dürften [105]. Betrachtet werde ein Wellenleiter mit einer transversalen Fallenfrequenz  $\omega = 2\pi \times 1000 \text{ s}^{-1}$ , dies entspricht einer Oszillatorlänge  $a_\perp = 0.34 \mu\text{m}$ . Das Verhältnis von Oszillatorlänge und Streulänge ist dann  $a_\perp/a_s \approx 60$ ; damit ist sichergestellt, dass wir uns nicht im Tonks-Girardeau Regime aufhalten (vgl. Abschnitt 3.2). Durch die Transversalfrequenz ist eine Energieskala  $\hbar\omega = 6.63 \times 10^{-31} \text{ J}$  festgelegt, dies ist genau die Nullpunktsenergie der transversalen Grundmode für den Fall  $g = 0$ . Für die Barrierenbreite wählen wir  $\sigma = 2a_\perp \approx 0.7 \mu\text{m}$ , und die Barrierenhöhe sei  $V_0 = 3\hbar\omega$ .

Wir wollen nun die Transmission im quasi-eindimensionalen Regime für fest vorgegebene einfallende Ströme  $j_i$  berechnen, also das *Fixed Input* Problem lösen. Der Wechselwirkungsparameter  $g$  ist durch die Wahl der Atomsorte, die das Kondensat bilden, vorgegeben, aber dadurch, dass wir die Teilchendichte erhöhen, können wir in ein Regime stärkerer Nichtlinearitäten vorstoßen. Darum betrachten wir

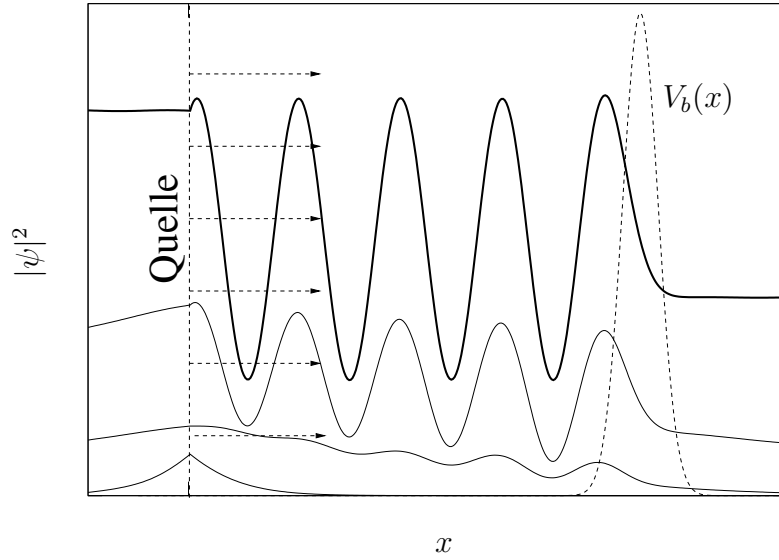
verschieden starke Teilchenströme  $j_i$ , um die Stärke der Nichtlinearität  $gn$  zu modulieren. Konkret betrachten wir Ströme im Intervall  $1 \times 10^4 s^{-1} \leq j_i \leq 4 \times 10^4 s^{-1}$  (die zugehörigen, typischen mittleren Teilchendichten sind von der Größenordnung  $10^6 - 10^7$  Atome /m; damit ist sichergestellt, dass die Ungleichung 3.21 nicht verletzt wird). Zudem ist auch die Bedingung  $na_s \ll 1$  erfüllt, somit können wir für die Nichtlinearität in der Gross-Pitaevskii-Gleichung  $\hbar\omega + gn$  setzen; die im Folgenden zu untersuchende Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet also

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_b(x) + \hbar\omega + g n(x, t) \right) \psi(x, t) . \quad (5.3)$$

Der Term  $\hbar\omega$  stellt lediglich eine konstante Verschiebung der Energieskala dar. Wir renormieren daher das chemische Potential in den folgenden Rechnungen  $\mu \rightarrow \mu - \hbar\omega$ . Wir untersuchen nun mit der Integrationsmethode aus den Abschnitten 4.3.2 und 4.3.3, ob bei einem zeitabhängigen Transportprozess stationäre Zustände besetzt werden und berechnen das zugehörige Transmissionsspektrum, das heißt, wir wollen die Transmissionswerte als Funktion des chemischen Potentials  $\mu$  des einfallenden Stromes darstellen.

Als erstes Ergebnis halten wir fest, dass bei dem von uns simulierten Prozess, wobei ein anfänglich leerer Wellenleiter graduell mit Materiewellen gefüllt wird, immer ein stationärer Zustand populiert wird und dieser dynamisch stabil ist. Die dynamische Stabilität prüfen wir numerisch, indem wir, auch nachdem der stationäre Zustand erreicht worden ist, die Zeitentwicklung fortführen und untersuchen ob sich das Dichteprofil der Wellenfunktion im Verlauf der Zeit noch ändert. Durch explizites Einsetzen des numerisch errechneten stationären Zustandes in die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung überprüfen wir, ob das numerische Resultat tatsächlich eine Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung ist. Dieser Einschaltvorgang und die Konvergenz gegen einen stationären Zustand ist exemplarisch in Abb.5.1 gezeigt. Die numerisch errechneten Transmissionsspektren zeigen wir in Abb.5.2. Die gestrichelte Linie zeigt das Spektrum für  $g = 0$  (es ist unabhängig von der Wahl des einfallenden Stromes  $j_i$ ). Das Spektrum zeigt den bereits aus elementaren quantenmechanischen Überlegungen zu erwartenden Verlauf: Die Transmissionswerte konvergieren gegen Null, wenn  $\mu$  wesentlich kleiner als die Barrierenhöhe  $V_0 = 3\hbar\omega$  ist und nähern sich dem Wert  $T = 1$  an, wenn  $\mu$  wesentlich größer als  $V_0 = 3\hbar\omega$  wird (klassischer Grenzfall).

Nehmen wir nun Wechselwirkung zwischen den Atomen an,  $g = 2\hbar\omega a_s > 0$ , so zeigt die Transmissionskurve bei gleichem Strom  $j_i = 1 \times 10^4 s^{-1}$  einen qualitativ ähnlichen Verlauf, die Transmissionswerte sind aber gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall kleiner. Diese Tendenz verstärkt sich, wenn wir die Nichtlinearität erhöhen, indem wir größere Ströme  $j_i$  in den Wellenleiter emittieren. Wir können als Ergebnis für die Transmission durch eine einzelne Barriere festhalten, dass die Wechselwirkung zu keiner qualitativen Änderung des Transmissions-



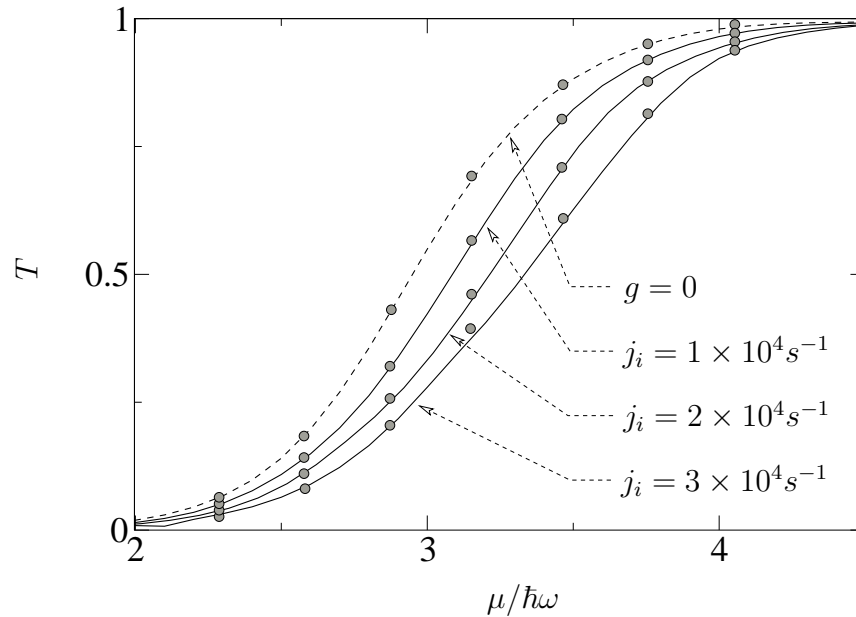
**Abbildung 5.1:** Eine von der Quelle emittierte monochromatische Materiewelle wird in einen anfänglichen leeren Materiewellenleiter mit Gaußförmiger Barriere injiziert und an der Barriere partiell reflektiert. Gezeigt sind vier Momentaufnahmen der Kondensatdichte  $|\psi|^2$  zu vier verschiedenen Zeiten. Die Dichte konvergiert schließlich gegen den stationären Streuzustand (dicke schwarze Linie), der dynamisch stabil ist.

spektrums führt, aber die Transmission bei größerer Nichtlinearität aufgrund der repulsiven Atom-Atom Wechselwirkung abnimmt.

Neben Gaußförmigen Barrieren wurden von uns auch andere Barrierenpotentiale wie zum Beispiel ein repulsives Kastenpotential untersucht; hierbei wurden stets qualitativ die gleichen Ergebnisse wie im Falle der Gaußförmigen Barriere gefunden. Daher erwarten wir generell, dass eine Einzelbarriere im Regelfall lediglich zu einer Verminderung der Transmissionswerte führt, wenn eine repulsive Wechselwirkung vorliegt. Wir vergleichen nun noch die Ergebnisse der quasi-eindimensionalen Rechnung mit einer vollständig dreidimensionalen Rechnung. Das heißt, wir greifen nun auf die in Abschnitt 4.3.5 entwickelte Methode zurück und lösen nun mittels numerischer Integration die dreidimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, r, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 + V_b(x) \right. \\ \left. + U_0 |\Psi(x, r, t)|^2 \right] \Psi(x, r, t) + S(t) \delta(x - x_0) e^{-i\mu t/\hbar} F(r). \quad (5.4)$$

Für  $F(r)$  ist gemäß Anhang 8.1  $F(r) = \phi(r)$  zu setzen, wobei  $\phi(r)$  die auf eins normierte transversale Grundmode des Wellenleiters ist. Für den Wechselwirkungsparameter  $U_0$  in der dreidimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung ist  $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s/m$  zu setzen. Da diese dreidimensionalen Rechnungen einen we-



**Abbildung 5.2:** Transmissionsspektren für ein Gaußförmiges Barrierenpotential (Parameter, siehe Text). Die gestrichelte Kurve zeigt  $T$  als Funktion von  $\mu$  für den Fall  $g = 0$ ; dieses Transmissionsspektrum ist unabhängig von der Wahl des Stromes. Die drei anderen Kurven zeigen  $T$  für den wechselwirkenden Fall für  $g = 2\hbar\omega a_s > 0$ . Die repulsive Wechselwirkung führt zu einer Verminderung der Transmission; die qualitative Struktur der Kurven ändert sich nicht. Die grauen Punkte zeigen die Transmissionen, die man aus einer vollständigen dreidimensionalen Rechnung erhält.

sentlich höheren numerischen Aufwand erfordern als die quasi-eindimensionalen Rechnungen, berechnen wir Transmissionswerte (gekennzeichnet als graue Punkte in der Abb. 5.2) nur für einzelne diskrete Werte von  $\mu$  und vergleichen die Resultate mit den quasi-eindimensionalen Vorhersagen. Wie wir in Abb. 5.2 sehen, stimmen die beiden Datensätze sehr gut überein. Dies bedeutet, dass bei dem von uns betrachteten Transport durch das Barrierenpotential keine Anregung in höhere Transversalmoden stattfindet und die adiabatische eindimensionale *Mean-Field* Beschreibung des Kondensats sehr gut die tatsächliche Situation im Regime schwacher und moderater Nichtlinearitäten, das wir hier betrachten ( $a_s n \ll 1$ ), beschreibt. Wir bemerken noch, dass im linearem Fall ( $g = 0$ ) a priori keine Anregung in höhere Moden stattfinden kann, da das Fallenpotential (5.1) separabel in  $x$  und  $r$  Richtung ist. Hat man nun zusätzlich eine Nichtlinearität der Form  $U_0|\psi(x, t)|^2$  zu berücksichtigen, so geht die Separabilität der Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.3) im Prinzip verloren; dieser Effekt manifestiert sich in unseren Rechnungen aber nicht, da für die von uns gewählten Systemparameter der Term  $U_0|\psi(x, t)|^2$  nur ein kleines zusätzliches effektives Potential darstellt.

### 5.1.2 Transport durch ein nicht-separables Quantenpunkt-kontaktpotential

Wir betrachten nun die andere oben angesprochene Realisierung für einen Quantenpunkt-kontakt, der durch eine Variation des transversalen Einschlusspotentials entlang der  $x$ -Achse erzeugt wird. Das Gesamtpotential ist also von der Form (2.15), wobei wir hier  $\omega(x) = \omega_0 + \delta\omega e^{-x^2/\sigma^2}$  annehmen wollen. Das Potential (5.2) ist offensichtlich nicht mehr in  $x$  und  $r$  Richtung separabel. Diese Tatsache wird sich in den folgenden Rechnungen manifestieren. Auch in diesem Abschnitt untersuchen wir nur solche Kondensatdichten, die so klein sind, dass die Nichtlinearität von der Form  $g|\psi|^2$  ist.

Wir beginnen unsere Untersuchungen mit der Auswertung der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii Gleichung. Es ist zu beachten, dass nun, wegen der Ortsabhängigkeit der Fallenfrequenz  $\omega(x)$ , auch der Wechselwirkungsparameter  $g(x) = 2\hbar a_s \omega(x)$  abhängig vom Ort  $x$  wird. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet daher

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hbar\omega(x) + g(x) |\psi|^2 \right) \psi. \quad (5.5)$$

Der Einfachheit halber arbeiten wir in diesem Abschnitt mit rationalisierten Einheiten, das heißt, wir machen in der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung die Ersetzungen  $t' = t\omega_0$ ,  $x' = x/a_\perp$ ,  $r' = r/a_\perp$ ,  $\sigma' = \sigma/a_\perp$  und  $\psi' = \psi/\sqrt{\nu}$ ; dabei ist  $\nu$  die konstante mittlere Teilchendichte, die durch den Wellenleiter fließt, wenn kein Quantenpunkt-kontaktpotential vorhanden und der Wellenleiter uniform ist;  $\nu$  wird aus der Dispersionsrelation

$$\mu = \frac{mj_0^2}{2\nu} + g\nu \quad (5.6)$$

der ebenen Welle bestimmt. Der Strom  $j_0$  ist ein frei wählbarer Einheitsstrom, der die Referenzdichte  $\nu$  festlegt. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung in rationalisierten Einheiten lautet dann (zur Vereinfachung der Notation ersetzen wir die gestrichenen Größen nun wieder durch ungestrichene Variablen).

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( 1 + \frac{\delta\omega}{\omega_0} e^{-x^2/\sigma^2} \right) + \tilde{g} \left( 1 + \frac{\delta\omega}{\omega_0} e^{-x^2/\sigma^2} \right) |\psi|^2 \right] \psi. \quad (5.7)$$

Der Wechselwirkungsparameter ist dann gegeben durch  $\tilde{g} = 2a_s\nu$ .

Wir wollen nun die Transmission bei festem chemischen Potential  $\mu$  als Funktion des einfallenden Stromes  $j_i$  (der in Einheiten von  $j_0$  gemessen wird) berechnen. Wir wählen für unsere Rechnung die Parameter,  $\mu = 2\hbar\omega_0$ ,  $\delta\omega = 3\omega_0/2$ . Zunächst integrieren wir wieder die quasi-eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung in Anwesenheit eines Materiewellen emittierenden Quellterms. Die Ergebnisse dieser Rechnungen für verschieden starke Wechselwirkungsparameter sind

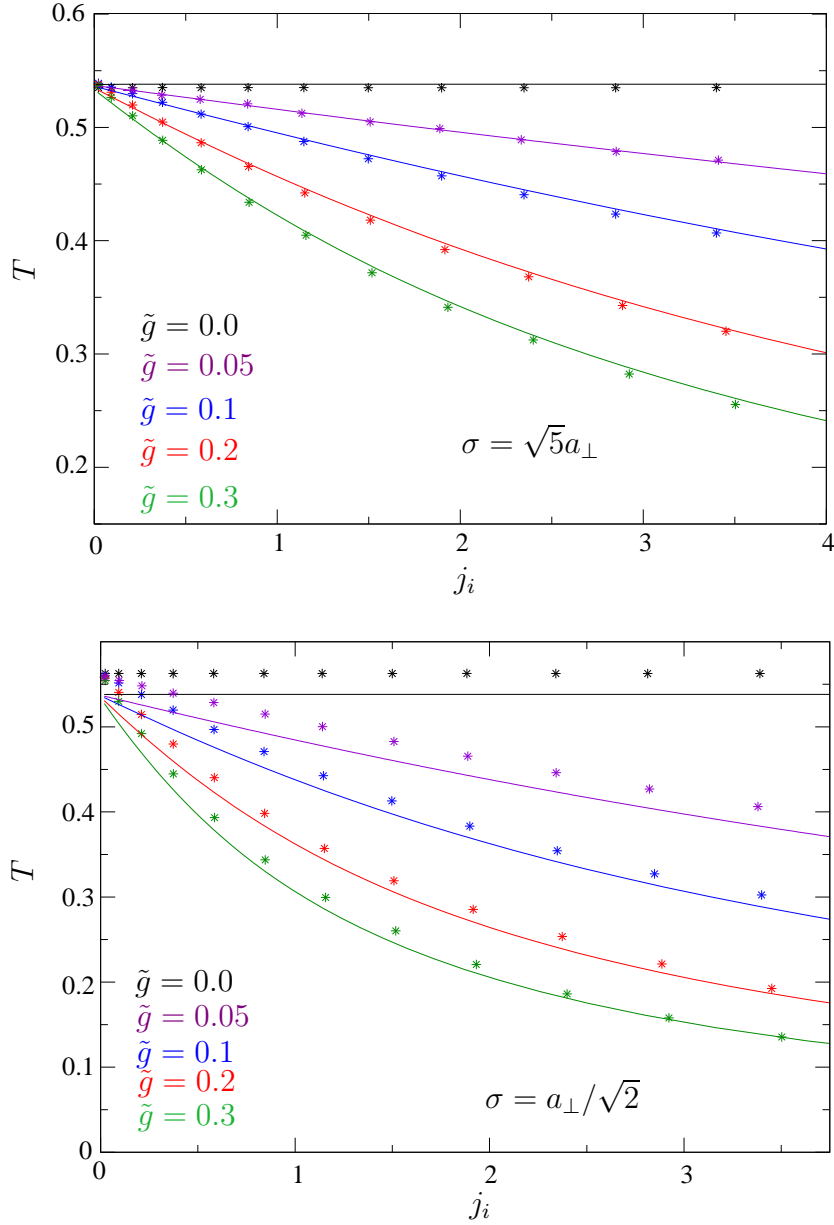
in Abb.5.3 dargestellt. Die beiden Teilabbildungen zeigen Transmissionen für zwei Quantenpunktkontakte mit unterschiedlicher longitudinaler Ausdehnung (entlang der  $x$ -Achse), die durch den Parameter  $\sigma$  bestimmt wird: Im oberen Teilbild wurde  $\sigma = \sqrt{5}a_{\perp}$  gesetzt, das heißt, die longitudinale Ausdehnung des Kontakts ist wesentlich größer als die typische laterale Ausdehnung des Wellenleiters  $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ . Im zweiten Teilbild ist  $\sigma = a_{\perp}/\sqrt{2}$  gesetzt worden, somit ist die longitudinale Ausdehnung des Kontaktes wesentlich kleiner als  $a_{\perp}$ . Betrachten wir zunächst die Resultate, die mittels der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung errechnet wurden (wir erinnern daran, dass in diesem adiabatischem Bild davon ausgegangen wurde, dass sich das gesamte Kondensat im transversalen Grundzustand befindet). Wie erwartet, stellen wir fest, dass im Fall  $\tilde{g} = 0$  die Transmission unabhängig von  $j_i$  ist. Nimmt nun  $\tilde{g}$  zu, so nimmt die Transmission mit steigender repulsiver Wechselwirkung und größer werdenden Strömen  $j_i$  ab, denn beides erhöht die Nichtlinearität  $\tilde{g}|\psi|^2$  des Systems.

In einem zweiten Schritt untersuchen wir den Transportprozess wieder, wie in Abschnitt 5.1.1, mit einer dreidimensionalen Rechnung. Da das hier betrachtete Potential (5.2) nicht separabel ist, erwarten wir bereits im linearen Fall Abweichungen von den Ergebnissen der eindimensionalen Rechnung. Diese Abweichungen sind darauf zurückzuführen, dass nun Anregungen aus der transversalen Grundmode in angeregte Moden möglich werden. Bereits intuitiv ist zu erwarten, dass die Diskrepanzen zwischen dem quasi-eindimensionalen Bild und der vollständigen dreidimensionalen Behandlung zunehmen, wenn das Verhältnis  $\sigma/a_{\perp}$  abnimmt, was einem sehr engen Quantenpunktkontakt entspricht. In der Tat wird dieses qualitative Bild durch die Arbeiten von Jääskeläinen und Stegholm auch quantitativ bestätigt [106, 107].

Wir wollen nun mittels der dreidimensionalen Rechnung überprüfen, ob solche nicht-adiabatischen Effekte auch in dem von uns betrachteten Quantenpunktkontakt eine Rolle spielen, und dazu die Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, r, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{m}{2} r^2 \left( 1 + \frac{\delta\omega}{\omega_0} e^{-x^2/\sigma^2} \right)^2 + U_0 |\Psi(x, r, t)|^2 \right] \Psi(x, r, t) \quad (5.8)$$

auswerten ( $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ ). Die Sterne in Abb.5.3 zeigen die Ergebnisse. Wir stellen fest, dass für  $\sigma = \sqrt{5}a_{\perp}$  die Ergebnisse sehr gut übereinstimmen, und wir uns im adiabatischen Regime befinden, wo das Verhältnis  $\sigma/a_{\perp}$  genügend groß ist, so dass Anregung höherer Transversalmoden unterbleiben. Hingegen sehen wir im Fall  $\sigma = a_{\perp}/\sqrt{2}$  eine relative Diskrepanz von ca 3% zwischen der eindimensionalen und dreidimensionalen Rechnung. Tendenziell sind die Transmissionen, die von der dreidimensionalen Rechnungen vorhergesagt werden, größer als die quasi-eindimensional berechneten Werte. Dies deutet darauf hin, dass zumindest eine



**Abbildung 5.3:** Gezeigt ist die Transmission durch einen Quantenpunktkontakt mit Potential (5.2), zum einen mit der eindimensionalen adiabatischen Gross-Pitaevskii-Gleichung (durchgezogene Linien), zum anderen vollständig dreidimensional berechnet (Sterne).  $T$  ist als Funktion des einfallenden Stromes  $j_i$  (in Einheiten von  $j_0$ ) bei festgehaltenem chemischen Potential  $\mu = 2\hbar\omega_0$  für verschiedene Werte  $\tilde{g}$  aufgetragen.

höhere Transversalmode angeregt ist, die einen zusätzlichen offenen Kanal für den Transport von Kondensat darstellt.

Wir wollen dies an dem hier gezeigten Beispiel in Abb.5.3, unten, noch näher diskutieren. Für den linearen Fall können wir diese Anregung von Transversalmoden einfach untersuchen, und die Projektion der Gesamtwellenfunktion auf die einzelnen Transversalmoden betrachten. Um die Wahrscheinlichkeit  $|c_\alpha|^2$  zu berechnen, mit der an einem Ort  $x$  entlang des Wellenleiters die Transversalmode  $\phi_\alpha(r)$  (hierbei nummeriert  $\alpha$  die Moden) besetzt ist, werten wir das Überlappintegral

$$|c_\alpha|^2 = 2\pi \int_0^\infty r dr \phi_\alpha(r) \Psi(x, r) \quad (5.9)$$

aus. Wenn wir dies exemplarisch für eine der dreidimensionalen Wellenfunktionen  $\Psi(r, x)$  aus unserem oben betrachteten Beispiel durchführen, so haben wir die Transversalmoden des zweidimensionalen harmonischen Oszillators zu verwenden, wobei nur diejenigen Moden mit Drehimpulsquantenzahl  $m_l = 0$  von Relevanz sind. Die ersten beiden Transversalmoden lauten

$$\phi_0(r) = \frac{1}{a_\perp \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{2a_\perp^2}} \quad E_0 = \hbar\omega(x) \quad (5.10)$$

$$\phi_1(r) = \frac{1}{a_\perp \sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{r^2}{a_\perp^2}\right) e^{-\frac{r^2}{2a_\perp^2}} \quad E_1 = 3\hbar\omega(x). \quad (5.11)$$

$E_0$  und  $E_1$  sind die zugehörigen Eigenenergien, die parametrisch vom Ort  $x$  abhängen. Berechnet man nun  $|c_1|^2$ , so ergibt sich für die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit  $|c_1|^2$  von  $x$  ein typischer Verlauf, wie er in Abb.5.4 abgebildet ist. Wir stellen fest, dass lokal beim Quantenpunktkontakt die erste Transversalmode angeregt ist (die Anregung weiterer höherer Transversalmoden ist so klein, dass sie vernachlässigt werden kann).

Das Abklingen der Besetzungswahrscheinlichkeit  $|c_1|^2$  in Upstream- und Downstream-Region ist leicht zu verstehen, wenn wir uns die energetischen Verhältnisse im Wellenleiter vor Augen halten. In genügend großer Entfernung vom Punktkontakt ist die Wellenfunktion von der Form

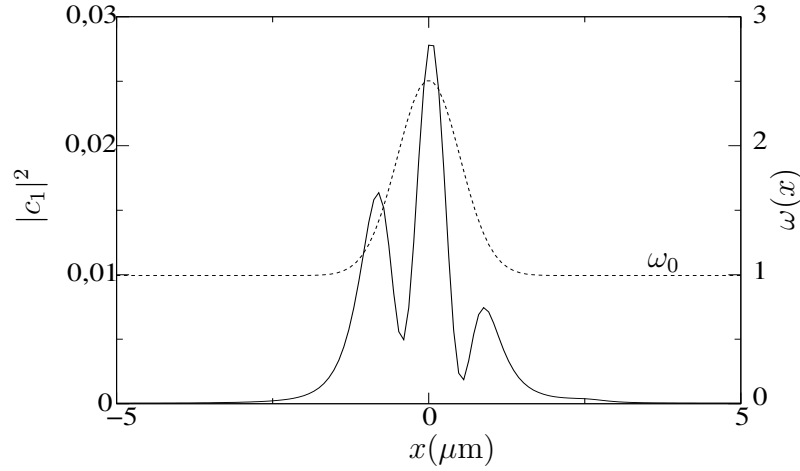
$$\Psi(x, r) = \sum_\alpha (A e^{ik_\alpha x} \phi_\alpha(r) + B e^{-ik_\alpha x} \phi_\alpha(r)); \quad (5.12)$$

$A$  und  $B$  sind die Amplituden der nach rechts bzw. links laufenden Wellenanteile. Für jede Mode muss separat gelten [48, 49]

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m} + E_\alpha. \quad (5.13)$$

Dabei ist  $E_\alpha$  die Eigenenergie der Mode und  $k_\alpha$  der Wellenvektor. Ist nun  $\mu > E_\alpha$  so ist  $k_\alpha$  reell, und wir haben nach links und nach rechts laufende ebene Wellen.





**Abbildung 5.4:** Durchgezogene Linie: Besetzungswahrscheinlichkeit  $|c_1|^2$  für die erste Transversalmode  $\phi_1(r)$ . Gestrichelte Linie: Radiale Einschlussfrequenz  $\omega(x) = \omega_0 + \delta\omega e^{-x^2/\sigma^2}$ . Die Wahrscheinlichkeit  $|c_1|^2$  ist nur in der direkten Umgebung des Quantenpunktkontaktes verschieden von null; dieses Verhalten ist auf die Existenz einer evaneszenten Mode zurückzuführen (vgl. Text).

Im anderen Fall  $\mu < E_\alpha$  ist  $k_\alpha$  rein imaginär, und die Exponentialfaktoren in (5.12) sind von der Form  $\exp(\pm k_\alpha x)$ . Aus Normierungsgründen müssen die Moden mit  $\mu < E_\alpha$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  gegen Null gehen; somit können diese Moden nur lokal, zum Beispiel in der Umgebung eines Quantenpunktkontaktes, angeregt sein. Solche nur lokal besetzten, nach außen hin exponentiell abfallenden Moden nennt man *evaneszente Moden*; wie eine genaue Analyse im Rahmen des Landauerschen Quantentransportformalismus [54] zeigt, tragen diese evaneszenten Moden zum gesamten Transport durch einen Punktkontakt bei und erhöhen somit die Transmission [108].

Mit dem Bild von lokal angeregten evaneszenten Moden haben wir somit ein qualitatives Verständnis für die Diskrepanz zwischen den Resultaten der adiabatisch eindimensionalen und vollständigen dreidimensionalen Rechnung erarbeitet. Auch im nichtlinearen Fall sehen wir Diskrepanzen zwischen den adiabatisch bzw. dreidimensional berechneten Transmissionen. Hier kann man zwar die Wellenfunktion wegen der Nichtlinearität nicht mehr durch eine Basis von orthonormalen Transversalmoden darstellen, dennoch gilt auch hier das Bild von den lokal besetzten evaneszenten Moden. Um dies zu zeigen, skizzieren wir in Anhang 8.2 eine Methode, die es im Regime kleiner Besetzungswahrscheinlichkeiten für die höheren Moden erlaubt, Korrekturen zu den adiabatisch errechneten Transmissionen zu finden.

Generell ist am Ende dieses Abschnittes noch anzumerken, dass - wie in obigen Beispiel demonstriert - unsere numerische Methode zur (dreidimensionalen) Simulation von Transport durch nicht separable Potentialstrukturen allgemein

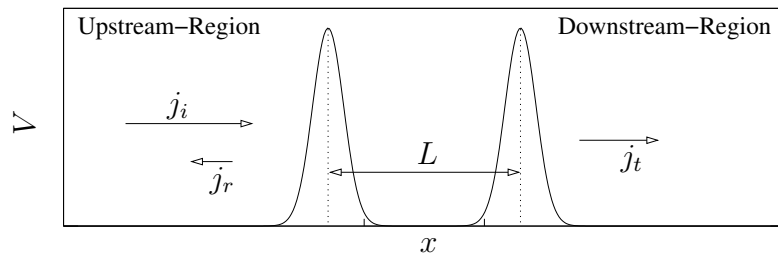
ein wichtiges Werkzeug darstellt, um explizit zu überprüfen, in welchen Regimen Quantentransport in einem adiabatischen, eindimensionalen Bild beschrieben werden kann.

## 5.2 Transport durch Doppelbarrierenpotentiale

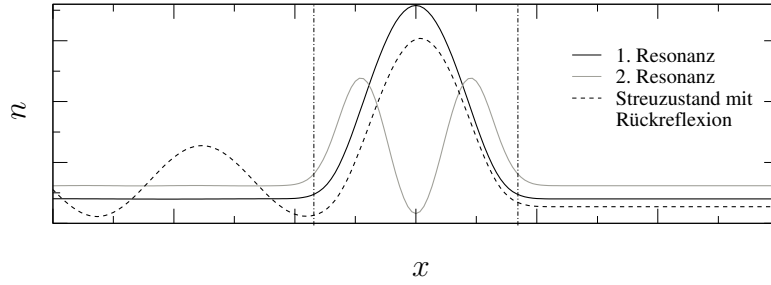
In den folgenden Abschnitten untersuchen wir den Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch Doppelbarrierenpotentiale. Sie bestehen aus zwei im Abstand  $L$  angeordneten Barrieren im Wellenleiter (vgl. Abb.5.5). Diese Konfiguration kann als ein Fabry-Perot Interferometer für Materiewellen angesehen werden, da sie ganz analog zu optischen Interferometern, die Transmission von Materiewellen aufgrund von Interferenzeffekten modulieren kann. In Analogie zu elektronischen Leitergeometrien, die in der mesoskopischen Physik des Elektronentransportes von Bedeutung sind, bezeichnen wir die Doppelbarrierenkonfiguration auch als (bosonischen) Quantenpunkt [58]. Die Bezeichnung *Quantenpunkt* hat sich deswegen auch im Kontext von Kondensattransportprozessen eingebürgert [56].

Solch ein Doppelbarrierenpotential kann zum Beispiel auf einem Atom-Chip durch eine geeignete Geometrie mikroskopischer Drähte erzeugt werden (vgl. Abschnitt 2.2.2). Eine alternative Möglichkeit zur Erzeugung des Doppelbarrierenpotentials besteht darin, zwei parallele Laser senkrecht zu einem magnetischen Wellenleiter einzustrahlen. Damit kann ein Doppelbarrierenpotential mit Gaußförmigen Barrieren erzeugt werden. Wir betrachten im Folgenden einen kohärenten Kondensatfluss, der durch ein symmetrisches Doppelbarrierenpotential mit Gaußförmigen Barrieren propagiert. Wir nehmen wieder ein enges harmonisches Transversalpotential an, damit wir wieder mit der effektiv eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung arbeiten können

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{db}(x) + g n(x, t) \right) \psi(x, t) ; \quad (5.14)$$



**Abbildung 5.5:** Schematische Darstellung eines symmetrischen Doppelbarrierenpotentials: Zwei gleich geartete Potentialbarrieren befinden sich in einem Wellenleiter; dadurch wird der Kondensatfluss (einfallender Teilchenstrom  $j_i$ ) aus der Upstream- in die Downstream-Region modifiziert (transmittierter Teilchenstrom  $j_t$ ).



**Abbildung 5.6:** Schematische Darstellung der Dichte  $n(x)$  des ersten und des zweiten Resonanten Zustandes (Die beiden vertikalen Linien geben die Position der beiden Barrieren an). Die gestrichelte Linie zeigt, zum Vergleich, ein gewöhnlichen Streuzustand mit Rückreflexion.

das Doppelbarrierenpotential habe die Form

$$V_{db}(x) = V_0 \left[ e^{-(x+L/2)^2/\sigma^2} + e^{-(x-L/2)^2/\sigma^2} \right]. \quad (5.15)$$

Hierbei gibt  $L$  den Abstand der beiden Gaußförmigen Barrieren an, und  $\sigma$  ist ein Parameter, der die Breite einer Barriere bestimmt.

Untersucht man nun die Transmissionseigenschaften dieser symmetrischen Doppelbarrierenpotentiale, so ist aus der elementaren Quantenmechanik bekannt, dass stromtragende resonante Transportmoden existieren (die so genannten *Breit-Wigner Resonanzen* [48]), die Transport mit perfekter Transmission  $T = 1$  zulassen. Wir wollen im Folgenden nun im Rahmen der *Mean-Field* Theorie der Frage nachgehen, ob solche resonanten Zustände auch für den Transport eines Bose-Einstein-Kondensats mit wechselwirkenden Atomen existieren, und unter welchen Bedingungen es möglich ist, diese in einem realistischen zeitabhängigem Experiment zu populieren.

Bevor wir uns diesen Fragen zuwenden, wollen wir noch eine Definition des Begriffs *resonanter Zustand* geben. Die hier interessierenden stromtragenden resonanten Zustände können als Streuzustände aufgefasst werden, die perfekte Transmission  $T = 1$  zulassen. Dies impliziert, dass ihre Dichteverteilung  $n(x)$  symmetrisch bezüglich der Symmetrieachse des Potentials  $V_{db}(x)$  ist; in der Upstream- und Downstream-Region haben sie konstante Dichte, da jede Dichteoszillation in der Upstream-Region von einer Rückreflexion herrühren würde. Abb.5.6 illustriert diesen Sachverhalt, indem für ein symmetrisches Doppelbarrierenpotential die Dichte des ersten und zweiten resonanten Zustandes gezeigt werden.

### 5.2.1 Resonante Transportmoden

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns zunächst mit der Frage, ob resonante Zustände (im Folgenden auch *Resonanzen* genannt) auch im nichtlinearen Fall

$g > 0$  existieren. Da wir hier zunächst lediglich nach der Existenz von stationären Streuzuständen fragen, aber noch nicht die Möglichkeit deren Besetzung untersuchen, betrachten wir hier die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\mu\psi(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ab}(x) + g n(x) \right) \psi(x). \quad (5.16)$$

Schreiben wir wieder, wie in Abschnitt 3.3.1, die Wellenfunktion als  $\psi(x) = A(x) \exp[iS(x)]$ , so können wir aus (5.16) wieder eine Differentialgleichung für die Amplitude  $A(x)$  der Wellenfunktion gewinnen

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 A}{dx^2} + \left( V_{ab}(x) + \frac{m}{2} \frac{j_t^2}{A^4} \right) A + g A^3. \quad (5.17)$$

Hierbei ist  $j_t$  wieder der in die Downstream-Region transmittierte Strom, den der stationäre Zustand  $\psi(x)$  trägt. Wir integrieren die Differentialgleichung (5.17) ausgehend von der Downstream-Region, wobei wieder die asymptotische Randbedingung  $A' = 0$  und  $A^2 = n_1$  für  $x \rightarrow \infty$  gelte, um der Bedingung für einen wohldefinierten Streuzustand genüge zu tun.

Wenn wir nun  $g$  festhalten (das ist sinnvoll, da wir somit eine Atomsorte mit einer wohldefinierten interatomaren Wechselwirkung betrachten), bleiben noch zwei Parameter, nämlich das chemische Potential  $\mu$  und der Strom  $j_t$ , die nun systematisch variiert werden, um alle möglichen stationären Streuzustände zu bekommen, die (5.17) erfüllen. Da wir uns speziell für resonante Streuzustände interessieren, führen wir ein Maß ein, das die Nähe eines Streuzustandes zu einem resonanten Zustand angibt. Solch ein Maß stellt der *Strömungswiderstand*

$$F_d = \int_{-\infty}^{\infty} dx n(x) \frac{dV_{ab}(x)}{dx} \quad (5.18)$$

dar. Die Größe  $F_d$  gibt den Impulsübertrag vom propagierenden Bose-Einstein-Kondensat auf das Streupotential  $V_{ab}(x)$  an, denn die Kraft auf das Barrierenpotential ist der Mittelwert des Operators  $dV_{ab}(x)/dx$  bezüglich der Kondensatwellenfunktion. Eine exakte Rechtfertigung kann mittels des Energie-Spannungstensors gegeben werden [109, 110]. Ist ein Streuzustand nun weit von einer Resonanz entfernt, so ist die Rückreflexion am Barrierenpotential groß, was zu einem endlichen Strömungswiderstand führt. Nahe einer Resonanz wird  $F_d$  klein, da die Transmission sich dem Wert  $T = 1$  nähert. Ist im Doppelbarrierenpotential exakt ein Resonanzzustand besetzt so gilt,  $F_d = 0$ ; dies sieht man unmittelbar anhand der Definition (5.18), wenn man sich vor Augen hält, dass sowohl das Potential  $V_{ab}(x)$ , als auch die Dichteverteilung  $n(x)$  der resonanten Mode spiegelsymmetrisch zum Ursprung sind.

Um den Strömungswiderstand zu berechnen, betrachten wir im Folgenden den Energie-Spannungstensor; dieser ist definiert durch (mit  $m = \hbar = 1$ )

$$T(x, t) = -Im \left[ \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right] + \frac{1}{2} \left| \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right|^2 - \frac{g}{2} |\psi(x, t)|^4 - V_{db}(x) |\psi(x, t)|^2. \quad (5.19)$$

Ist die Wellenfunktion stationär, so lässt sich zeigen, dass der Zusammenhang besteht [109]

$$F_d = T(+\infty) - T(-\infty). \quad (5.20)$$

Setzen wir  $\psi(x) = A(x) \exp[iS(x)]$  in (5.19) ein, so finden wir

$$T(x) = \frac{1}{2} \left( \frac{dA}{dx} \right)^2 + W(n) - V_{db}(x)n$$

mit  $W(n) = \frac{mj_t^2}{2n} + \mu n - \frac{g}{2}n^2;$  (5.21)

(es ist  $n = A^2$ ). In der Upstream und Downstream-Region ist  $V_{db}(x) = 0$ , das heißt,  $T(x)$  nimmt dort die besonders einfache Form

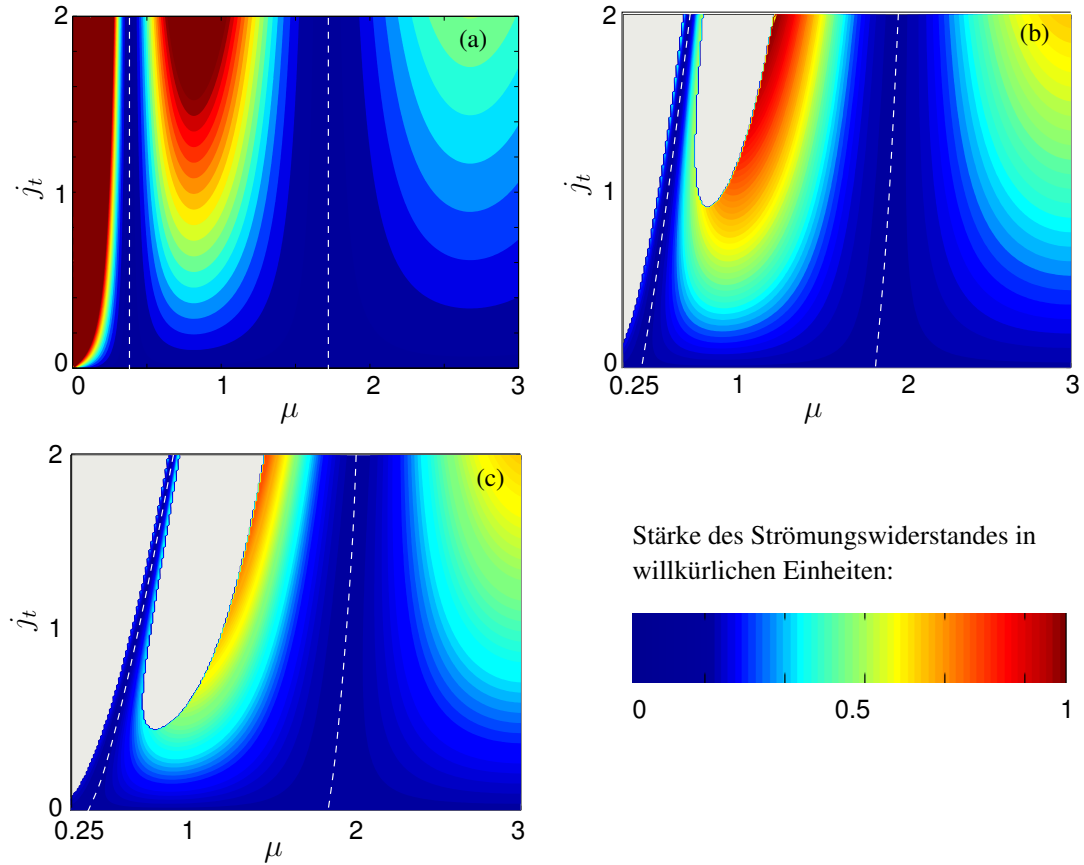
$$T(x) = \frac{1}{2} \left( \frac{dA}{dx} \right)^2 + W(n) \quad (5.22)$$

an. Dies ist aber gleich der in Abschnitt 3.3.2 eingeführten klassischen Energie des fiktiven Teilchens. Somit können wir in der Upstream- bzw. Downstream-Region  $T(x) = E$  schreiben. Damit und mit (5.20) ist der Strömungswiderstand einfach als die Differenz von Upstream- und Downstream Energie gegeben

$$F_d = E_u - E_d. \quad (5.23)$$

Diese Größe ist numerisch leicht zugänglich, wenn man die zu (5.17) äquivalenten Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.70) integriert.

Wir untersuchen nun die stationären Streuzustände, die Existenz von Resonanzen und die Größe  $F_d$  anhand folgenden Beispiels, das alle relevanten Charakteristika von resonantem Transport aufweist. Wir verwenden natürliche Einheiten und setzen  $m = 1$ ,  $\hbar = 1$  und  $\omega = 1$ . Für die Barriere Wählen wir  $L = \pi$ ,  $V_0 = 3$  und  $\sigma = \pi/10$ . Die Abb.5.7 zeigt nun den Strömungswiderstand  $F_d$  als Funktion des chemischen Potentials  $\mu$  und des Stromes  $j_t$  für verschiedene Wechselwirkungsparameter  $g$ . Die Größe  $F_d$  ist in willkürlichen Einheiten (der maximal auftretenden Strömungswiderstand wird auf  $F_d^{max} = 1$  normiert) als Farbintensität codiert aufgetragen. In Teilabbildung (a) ist der lineare Fall ( $g = 0$ ) gezeigt. Die Positionen



**Abbildung 5.7:** Strömungswiderstand  $F_d$ , den ein durch ein Doppelbarrierenpotential propagierendes Kondensat erfährt, für drei verschiedene Wechselwirkungsparameter (Teilbild (a):  $g = 0$ , Teilbild (b):  $g = 0.05$ , Teilbild (c):  $g = 0.1$ ).  $F_d$  ist in willkürlichen Einheiten farbcodiert aufgetragen; der Maximalwert von  $F_d$  ist auf 1 normiert. In den hellgrau gefärbten Regionen existieren keine stationären Streuzustände. Die Positionen der 1. und 2. Resonanz sind durch weiße gestrichelte Linien markiert. Im nichtlinearen Fall ( $g > 0$ ) werden die Positionen der Resonanzen in der  $\mu$ - $j_t$  Ebene vom Strom  $j_t$  abhängig.

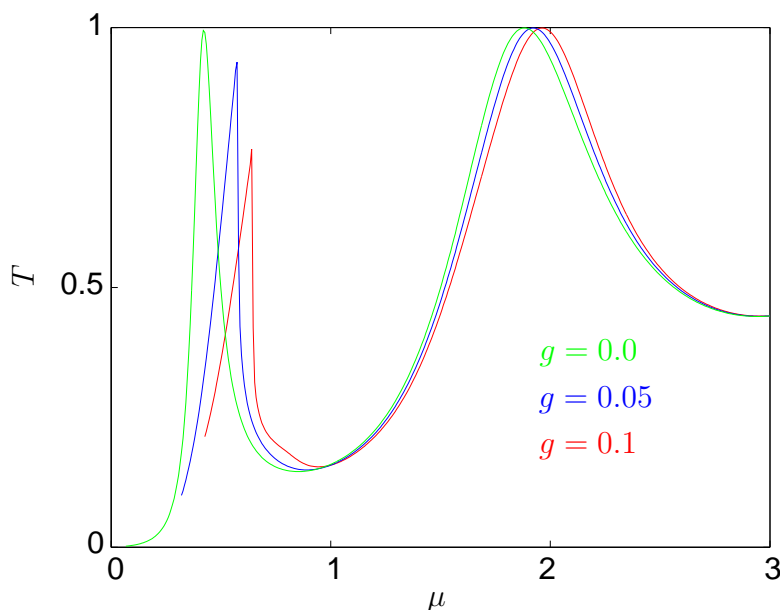
der resonanten Zustände sind durch das Verschwinden des Strömungswiderstandes festgelegt. Die Punkte an denen  $F_d$  exakt Null wird, sind durch die weißen gestrichelten Linien markiert. In Abb.5.7 (a) sind die 1. und 2. Resonanz deutlich zu erkennen. Wie erwartet, sind die Positionen der Resonanzen unabhängig vom Strom  $j_t$ , daher sind die beiden gestrichelten Linien für  $g = 0$  Geraden. Des Weiteren stellen wir fest, dass  $F_d$  größer wird, wenn wir uns von den Resonanzen entfernen. Auch wenn man den Strom  $j_t$  erhöht, nimmt  $F_d$  zu, da das propagierende Kondensat dann einen höheren Impuls trägt. In Abb.5.7 (b) ist der Fall  $g = 0.05$  gezeigt. Im Gegensatz zum linearen Fall, wo das chemische Potential  $\mu$  der Resonanz unabhängig von  $j_t$  ist, nimmt hier nun  $\mu$  mit größeren Strömen  $j_t$  zu. Wir stellen des Weiteren fest, dass nicht mehr für alle  $\mu$ - $j_t$  Paare stationäre Zustände mit nicht divergierender Amplitude  $A(x)$  existieren. Diese divergierenden Gebiete sind in der Abbildung hellgrau markiert. Generell lässt sich aussagen, dass Gebiete in der  $\mu$ - $j_t$  Ebene, die im linearen Fall einen starken Strömungswiderstand aufweisen, nun zu *verbotenen* Gebieten werden. Stationäre Zustände existieren bei schmalen Resonanzen (hier die 1. Resonanz) nur noch in unmittelbarer Umgebung der Resonanz, wenn der Strom  $j_t$  zunimmt. Dieses Szenario tritt noch deutlicher zutage, wenn wir den Fall  $g = 0.1$  betrachten (Abb.5.7 (c)). Die Abhängigkeit der Resonanzpositionen von  $j_t$  wird stärker, und die Fläche, für die keine stationären Zustände existieren, nimmt zu.

Als wichtiges Ergebnis halten wir aber fest, dass auch im nichtlinearen Fall resonante Zustände existieren. Ob diese in einem zeitabhängigen Transportprozess auch tatsächlich besetzt werden, soll im nächsten Abschnitt untersucht werden.

### 5.2.2 Transmission durch ein Doppelbarrierenpotential

Nachdem wir nun die stationären Zustände untersucht haben und feststellten, dass auch im nichtlinearen Fall Resonanzen existieren, wenden wir uns nun der Frage zu, inwieweit diese Resonanzen in einem zeitabhängigen Prozess besetzt werden können. Dazu untersuchen wir die Transmission  $T$  durch das Doppelbarrierenpotential bei festem einfallenden Strom  $j_i$  (Fixed Input Problem) und variieren systematisch das chemische Potential  $\mu$ . Wir bewegen uns dabei im Regime kleiner Nichtlinearitäten, da diese, wie sich später herausstellen wird, von experimenteller Relevanz sind. Wir stellen uns dazu wieder vor, ein monochromatischer Strahl von Bose-Einstein-Kondensat werde in einen anfänglich leeren Wellenleiter injiziert. Diesen Prozess simulieren wir wieder mit den Methoden von Abschnitt 4.3, um damit zu untersuchen, welche stationären Streuzustände besetzt werden können.

Für das im Folgenden zu diskutierende Beispiel verwenden wir wieder natürliche Einheiten  $m = 1$ ,  $\hbar = 1$  und  $\omega = 1$ . Wir wählen  $L = \pi$ ,  $V_0 = 3$  und  $\sigma = \pi/20$ . Den einfallenden Strom setzen wir mit  $j_i = 1$  fest. Die Transmission wird gemäß

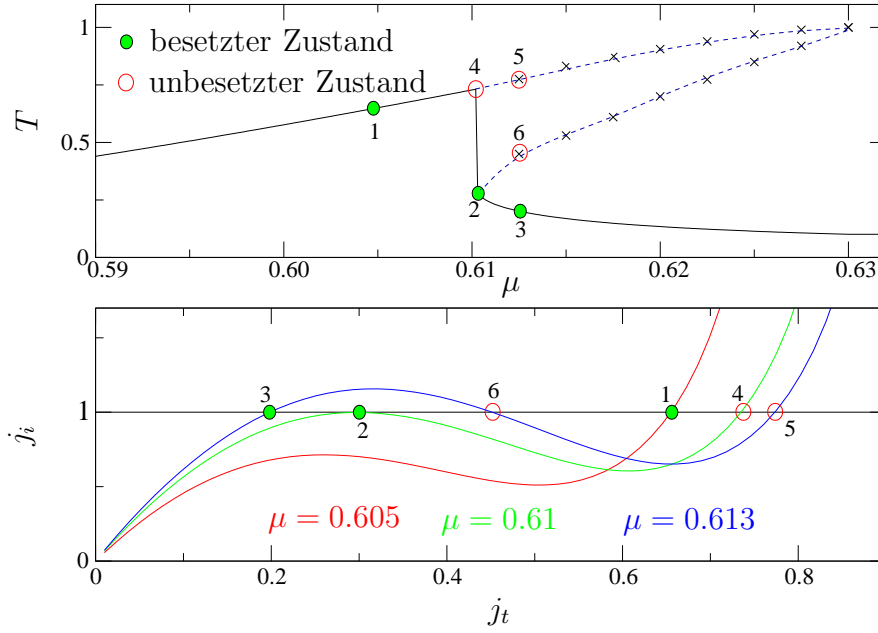


**Abbildung 5.8:** Gezeigt werden Transmissionsspektren, die mittels des zeitabhängigen Integrationsansatzes berechnet wurden. Für den linearen Fall ( $g=0$ ) finden wir die erwarteten Breit-Wigner Resonanzen (gezeigt sind 1. und 2. Resonanz), während im nichtlinearen Fall bei engen Resonanzen (hier bei der 1. Resonanz) die perfekte Transmission  $T = 1$  unterdrückt wird.

4.95 bestimmt. Die Ergebnisse dieser Transmissionsrechnungen sind in Abb.5.8 gezeigt. Für den Fall  $g = 0$  (grüne Kurve) finden wir die erwarteten Breit-Wigner Resonanzen; die erste Resonanz liegt in unserem Beispiel bei  $\mu = 0.46$ , die zweite bei  $\mu = 1.84$ . Für  $g > 0$  (blaue und rote Kurven) werden die Resonanzen im Transmissionsspektrum asymmetrisch, wobei für enge Resonanzen die perfekte Transmission  $T = 1$  unterdrückt wird (in unserem Beispiel wird die erste Resonanz im nichtlinearen Fall unterdrückt). Des Weiteren stellen wir fest, dass im nichtlinearen Fall, für kleine chemische Potentiale  $\mu$ , keine stationären Transmissionszustände mehr existieren; dies sieht man daran, dass die blaue und rote Kurve für kleine  $\mu$  abbricht. In diesem Regime würde nämlich für eine stationäre Transportmode die Wechselwirkungsenergie größer als das chemische Potential werden, somit kann es keinen stationären Streuzustand geben.

Wesentlich komplexer ist der Mechanismus, der zur Unterdrückung der Resonanzen im nichtlinearen Fall führt: Die stufenartige Struktur in den nichtlinearen Transmissionsspektren deutet auf ein Bistabilitätsphänomen hin, wie es auch aus der nichtlinearen Optik bekannt ist [111]. Ähnliche Bistabilitätsphänomene, die auf die Coulombwechselwirkung zurückzuführen sind, beobachtet man auch bei elektronischem Transport durch Quantentröge [112–114]. Tatsächlich können mittels der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.17) weitere Zweige im Transmissionsspektrum gefunden werden. Dazu variieren wir für ein gegeb-





**Abbildung 5.9:** Oben: Bistabilität im Transmissionsspektrum bei der Resonanz: Rechts von der Stufe existiert ein Bereich bei dem drei mögliche Zustände parallel existieren. Trägt man  $j_i$  gegen  $j_t$  auf (unten), so sieht man, dass links von der Stufe nur ein stationärer Zustand existiert, der zu einem vorgegebenem einfallenden Strom (hier  $j_i = 1$ ) gehört, während es rechts von der Stufe drei solche stationären Zustände gibt. Bei einem zeitabhängigen Einschaltvorgang werden aber lediglich die Zustände mit kleinstmöglicher Transmission besetzt; diese Zustände sind mit grünen Punkten markiert, während nicht-populierte Zustände durch einen roten Kreis gekennzeichnet sind.

nes chemisches Potential  $\mu$  den Strom  $j_t$  systematisch von 0 bis zu dem möglichem Maximalwert  $j_t^{max}$ , der durch das Sattelpunktkriterium (3.73) bestimmt ist. Zu jedem Wertepaar  $\mu, j_t$  können wir dann durch Integration von (5.17) den zugehörigen, eindeutig bestimmten Streuzustand bestimmen. Da wir uns im Regime kleiner nichtlinearer Parameter  $g$  bewegen, können wir zu diesen Streuzuständen die zugehörige Transmission  $T$  mittels des Näherungsverfahrens aus Abschnitt 4.2.3 bestimmen (vgl. (4.31)). Damit kann der einfallende Strom  $j_i$  approximativ bestimmt werden, es gilt  $j_i = j_t/T$ . Somit können wir  $j_i$  als Funktion von  $j_t$  auftragen und auf diese Weise die Zustände finden, die zu einem bestimmten einfallenden Strom  $j_i$  (in unserem Beispiel  $j_i = 1$ ) gehören.

Wir können nun speziell mit dieser Methode die Umgebung nahe einer der Stufen im Transmissionsspektrum untersuchen. Im unteren Teil von Abb.5.9 zeigen wir  $j_t$ - $j_i$  Kurven für drei verschiedene  $\mu$ -Werte nahe einer Stufe, die beim chemischen Potential  $\mu_s = 0.61$  liegt. Die Rote Kurve zeigt die  $j_t$ - $j_i$  Charakteristik für einen  $\mu$ -Wert, der etwas kleiner als  $\mu_s$  ist; diese Kurve nimmt genau einmal den Wert  $j_i = 1$  an (markiert durch einen grünen Punkt mit Ziffer 1). Der zu-

gehörige Streuzustand wird auch bei dem zeitabhängigen Propagationsprozess besetzt. Seine Position ist ebenfalls in der Transmissionskurve (Abb.5.9, oben) mit einem grünen Punkt und der Ziffer 1 markiert. Betrachten wir nun die  $j_t$ - $j_i$  Kurve für ein chemisches Potential  $\mu > \mu_s$  (blaue Kurve), so stellen wir fest, dass die Horizontale mit  $j_i = 1$  nun dreimal geschnitten wird. Somit gibt es drei mögliche stationäre Lösungen, die die Gross-Pitaevskii-Gleichung (5.17) erfüllen. Betrachtet man nun aber wieder das Transmissionsspektrum, so sieht man, dass bei dem zeitabhängigen Einschaltprozess nur der Zustand mit kleinstmöglichem Strom populiert wird (grüner Punkt mit Ziffer 3); die beiden anderen Zustände (markiert durch rote Kreise mit Ziffern 5 und 6) werden in diesem experimentell relevanten Transportprozess nicht besetzt. Das chemische Potential  $\mu_s$  der Stufe ist in diesem Bild genau dadurch festgelegt, dass die  $j_t$ - $j_i$  Charakteristik einen Schnittpunkt und einen Berührungspunkt (markiert mit einem grünen Punkt und Ziffer 2) aufweist. Sobald also zwei, oder mehrere stationäre Lösungen der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung, mit vorgegebenem einfallendem Strom  $j_i$  existieren, wird durch den von uns betrachteten zeitlichen Einschaltvorgang die Mode mit dem kleinstmöglichen transmittierten Strom  $j_t$  besetzt.

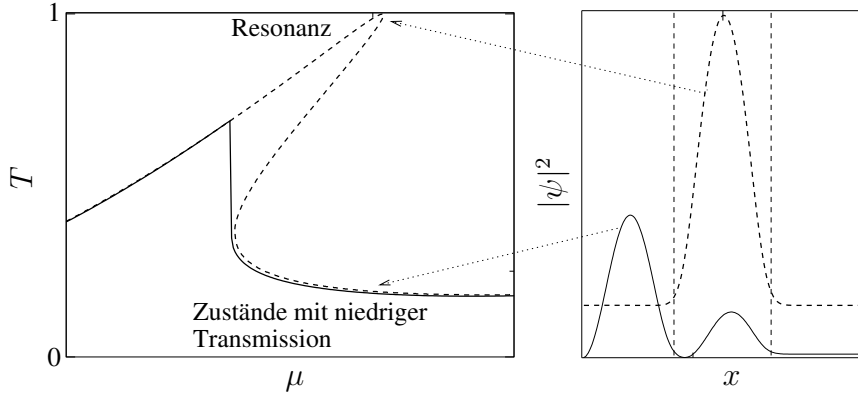
Wir können nun die Suche nach stationären Lösungen mit einfallendem Strom  $j_i = 1$  systematisch auf die gesamte Umgebung der Transmissionsstufe ausdehnen: Das Resultat ist durch die gestrichelte blaue Linie in Abb.5.9, oben, dargestellt: Zusätzlich zu dem durch die numerische Integration erhaltenen Spektrum existieren zwei zusätzliche Lösungszweige, die sich verbinden und eine nasenförmig verbogene Resonanzspitze formen. An der Spitze dieser Struktur (in unserem Beispiel bei  $\mu = 0.63$ ) finden wir den resonanten Zustand mit perfekter Transmission  $T = 1$ .

Wir halten also fest, dass es in der Umgebung von Stufen in der Transmissionscharakteristik zu einer Bistabilitätsstruktur kommt, die auf einem endlichem  $\mu$  Intervall drei mögliche stationäre Zustände zulässt, aber in einem Transportexperiment, bei dem eine monochromatische Materiewelle in einen anfangs leeren Wellenleiter injiziert wird, werden nur die Zustände mit niedrigster Transmission besetzt. Stellt man den möglichen Resonanzzustand und den tatsächlich besetzten Zustand mit geringer Transmission gegenüber (vgl. Abb. 5.10), so wird unschwer ersichtlich, dass die Wechselwirkungsenergie

$$E_{int} = g \int_{-L/2}^{+L/2} |\psi(x)|^2 dx \quad (5.24)$$

des Kondensats zwischen den beiden Potentialbarrieren für den resonanten Zustand viel größer ist, als für den zweiten möglichen Zustand. Dadurch, dass letzterer besetzt wird, kann das System seine Wechselwirkungsenergie minimieren.

Das Verbiegen der Resonanzspitzen und die daraus resultierende Unterdrückung

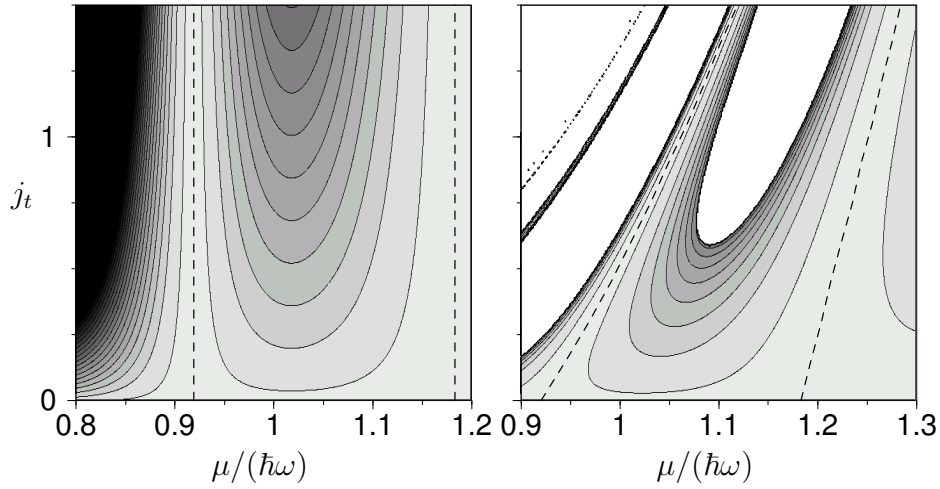


**Abbildung 5.10:** Links: Vergrößerte Darstellung der Stufe im Transmissionspektrum. Rechts von der Stufe gibt es drei mögliche stationäre Streuzustände. Bei einem zeitabhängigen Transportprozess werden nur die Zustände mit minimaler Transmission besetzt (schwarze, durchgezogene Linie). An der Spitze der Resonanzkurve existieren parallel der Resonanzzustand (gestrichelte Linie im rechten Bild) und ein weiterer Zustand mit kleiner Transmission (durchgezogene Linie im rechten Bild). Die beiden vertikalen Linien im rechten Bild markieren die Position der Barrieren.

des resonanten Kondensatflusses ist ein Effekt, der mit der Stärke der Nichtlinearität einhergeht. Damit kann man auch verstehen, warum die Verbiegung der Resonanzspitzen bei höheren Resonanzen (also bei größeren  $\mu$ -Werten) weniger ausgeprägt ist, da dort das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie und kinetischer Energie zugunsten der letzteren verschoben ist; dadurch sind die nichtlinearen Eigenschaften weniger ausgeprägt, und die Verbiegung der Resonanzspitzen ist so schwach, dass es nur noch zu einer kleinen Verschiebung der Resonanzen, hin zu größeren  $\mu$ -Werten, kommt, aber keine Bistabilität mehr auftritt. In unserem Beispiel ist dies bereits bei der zweiten Resonanz der Fall. Im Allgemeinen lassen sich die Positionen der Resonanzen nicht analytisch berechnen; für den Fall eines Doppelbarrierenpotentials, das aus zwei  $\delta$ -Barrieren besteht, ist ein analytischer Zugang jedoch möglich. Eine Formel, die zur Abschätzung der Position der 1. Resonanz für sehr enge Barrierenpotentiale dienen mag, leiten wir in Anhang 8.3 ab.

### 5.2.3 Eine mögliche experimentelle Realisierung

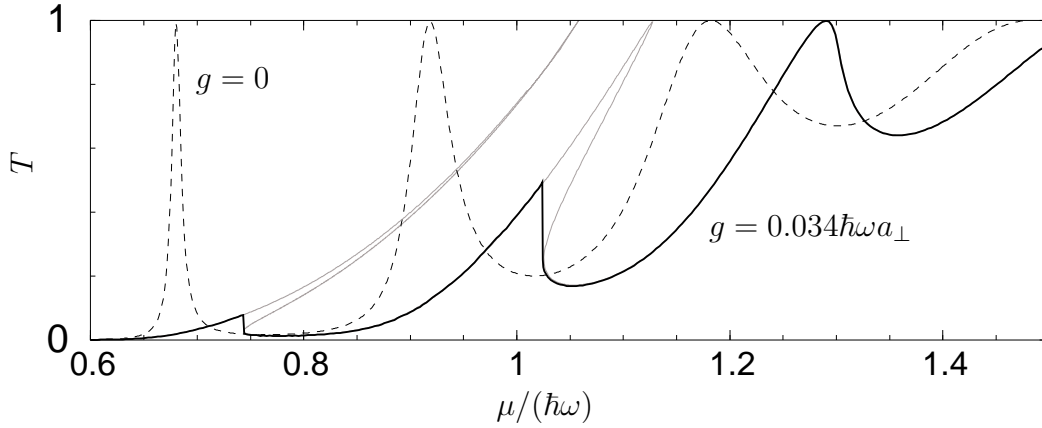
In diesem Abschnitt diskutieren wir eine mögliche experimentelle Realisierung des resonanten Transports. Im Gegensatz zu den vorherigen Abschnitten, die die grundlegenden Phänomene vorgestellt haben, wollen wir nun numerische Ergebnisse für ein Wellenleitersystem mit realistischen Größenskalen präsentieren. Wegen ihrer außerordentlichen experimentellen Relevanz betrachten wir  $^{87}\text{Rb}$  Atome; ihre  $s$ -Wellenstreuungslänge beträgt  $a_s = 5.77\text{nm}$ . Für den zylindersym-



**Abbildung 5.11:** Strömungswiderstand  $F_d$ , der vom Kondensat auf das Doppelbarrierenpotential übertragen wird als Funktion von  $\mu$  und  $j_t$  (in Einheiten von  $\omega$ ) für  $g = 0$  (links) und  $g = 0.034\hbar\omega a_\perp$  (rechts). Hellgraue Gebiete entsprechen einem geringen, dunkelgraue Regionen einem starken Strömungswiderstand. In den weißen Regionen existieren keine stationären Zustände. Die Positionen der 6. und 7. Resonanz sind durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

metrischen harmonischen Wellenleiter nehmen wir eine Transversalfrequenz von  $\omega = 2\pi \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  an, das entspricht einer harmonischen Oszillatorbreite  $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega} = 0.34 \mu\text{m}$ . Dies ergibt einen Wechselwirkungsparameter der Größe  $g = 0.034\hbar\omega a_\perp$ . Für die Gaußförmige Barriere wählen wir die Parameter  $V_0 = \hbar\omega$  und  $L = 10\sigma = 5 \mu\text{m} \simeq 14.7a_\perp$ .

Zunächst betrachten wir wieder den Strömungswiderstand  $F_d$  als Funktion von  $\mu$  und  $j_t$  (wie im vorherigen Abschnitt), um eine erste qualitative und quantitative Einschätzung vornehmen zu können, für welche chemischen Potentiale Resonanzen zu erwarten sind. Im linken Teil der Abb.5.11 ist der Strömungswiderstand für den Fall  $g = 0$  in der Umgebung der 6. und 7. Resonanz aufgetragen. Die Resonanzen sind gut als Minima der Größe  $F_d$  erkennbar. In Abb.5.11 rechts, zeigen wir das  $\mu$ - $j_t$  Diagramm für  $g = 0.034\hbar\omega a_\perp$ . Wir stellen wieder eine starke Abhängigkeit der Resonanzposition vom Strom  $j_t$  fest; stationäre Zustände existieren wiederum nur in der Umgebung der Resonanzen. Man erkennt, dass der Bereich, in dem stationäre Zustände existieren, mit kleiner werdendem  $\mu$  immer mehr auf die unmittelbare Umgebung der Resonanzen beschränkt wird; so sind in der Abbildung noch die beiden extrem schmalen 4. und 5. Resonanzen zu erkennen. Solche schmale Resonanzen sind nicht geeignet, experimentell untersucht zu werden, da zu ihrer Detektion eine extrem gute Kontrolle über das chemische Potential vonnöten wäre. Wir konzentrieren uns daher im Weiteren hauptsächlich auf die 6. und 7. Resonanz, die genügend große Breiten aufweisen.

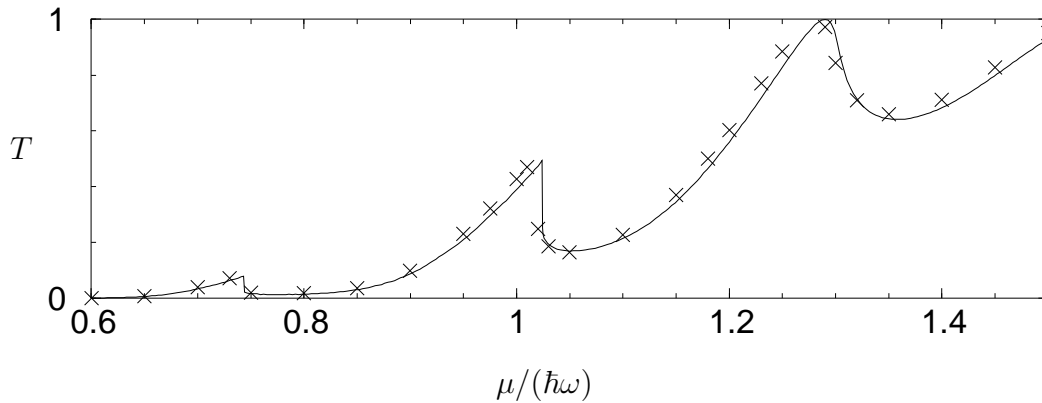


**Abbildung 5.12:** Transmissionsspektrum (schwarze Kurve) für  $g = 0.034\hbar\omega a_{\perp}$ , das man bei einem zeitabhängigem Propagationsprozess erwartet, wenn man einen einfallenden Teilchenstrom  $j_i = 1.6\omega$  annimmt. Die gestrichelte Linie zeigt zum Vergleich das Spektrum für  $g = 0$  mit den symmetrischen Breit- Wigner Resonanzen. Die in einem zeitabhängigen Transportprozess nicht besetzten Zweige des nichtlinearen Transmissionspektrums sind ebenfalls aufgetragen (graue Kurven).

Wir betrachten nun einen monochromatischen einfallenden kondensierten Teilchenstrom mit  $j_i = 10^4$  Atomen/s  $= 1.6\omega$ . Wir berechnen wie im vorherigen Kapitel das Transmissionsspektrum mittels Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Quellterm. Die numerisch errechneten Transmissionspektren sind in Abb.5.12 aufgetragen. In der Abbildung sind die 5., 6. und 7. Resonanz zu sehen, die im linearen Fall symmetrisch sind und mit zunehmendem  $\mu$  breiter werden. Für den wechselwirkenden Fall mit  $g = 0.034\hbar\omega a_{\perp}$  zeigt sich, dass die 5. Resonanz noch stark unterdrückt ist, aber bei der 6. Resonanz auf experimentell relevanten Größenskalen eine Stufe im Transmissionsspektrum zu erwarten ist. Die 7. Resonanz zeigt bereits kein Bistabilitätsphänomen mehr. (In der Abbildung sind der Vollständigkeit halber ebenfalls die nicht besetzten Zweige des Spektrums eingezeichnet).

Aus dieser Rechnung schließen wir, dass besonders die Resonanzen am Übergangsbereich, wo erstmals bistabiles Verhalten einsetzt, besonders geeignet sein dürften, die Stufenstruktur zu beobachten; die Resonanzen bei noch kleineren chemischen Potentialen sind so schmal, dass sie im nichtlinearen Fall fast vollständig unterdrückt werden, so dass man dort eine nur wenig von Null verschiedene Transmission erwartet.

Wir haben den resonanten Transport bisher nur im quasi-eindimensionalen Modell betrachtet, für eine eventuelle experimentelle Umsetzung ist es aber auch von großer Wichtigkeit zu untersuchen, ob auch im realen dreidimensionalen Wellenleiter mit Doppelbarrierenpotential ein Transmissionsspektrum, wie in Abb.5.12 gezeigt, gefunden wird. Wir wiederholen daher die numerische Rechnung nun für



**Abbildung 5.13:** Die schwarze Kurve ist das Transmissionsspektrum, das mittels der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung berechnet wurde. Die Kreuze sind Transmissionen, die mittels Integration der dreidimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung gewonnen wurden. Wir stellen eine sehr gute Übereinstimmung fest.

einen dreidimensionalen Wellenleiter. Wir integrieren also die dreidimensionale, zylindersymmetrische Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, r, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 + V_{db}(x) \right. \\ \left. + U_0 |\Psi(x, r, t)|^2 \right] \Psi(x, r, t) + S(t) \delta(x - x_0) e^{-i\mu t/\hbar} F(r). \quad (5.25)$$

(Es wird somit nun keine adiabatische Näherung gemacht). Der Wechselwirkungsparameter  $U_0$  ist wieder durch die  $s$ -Wellenstreulänge gegeben,  $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ . Die Integration von (5.25) wird gemäß den in Abschnitt 4.3.5 beschriebenen Methoden durchgeführt. Die Größe  $F(r)$  ist die niedrigste Transversalmode des harmonischen Wellenleiterpotentials. Wir vergleichen die Ergebnisse dieser vollständigen dreidimensionalen Rechnung mit den Resultaten, die wir durch Integration der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung erhalten haben. In Abb.5.13 sind, neben dem bereits in Abb.5.12 gezeigten Transmissionsspektrum, nun auch die Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnung aufgetragen. Wir stellen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den beiden Rechnungen fest. Damit haben wir sichergestellt, dass die am Anfang des Abschnitts gewählten Parameter das Doppelbarriersystem im Wellenleiter so dimensionieren, dass die adiabatische Beschreibung durch die quasi-eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung korrekte Resultate ergibt. Dies erlaubt es, den numerischen Aufwand gering zu halten (letzterer ist bei der vollständigen Integration der dreidimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung erheblich höher), wenn wir im nächsten Abschnitt die temporäre Besetzung bistabiler Resonanzen untersuchen.

### 5.2.4 Temporäre Besetzung eines bistabilen resonanten Zustandes

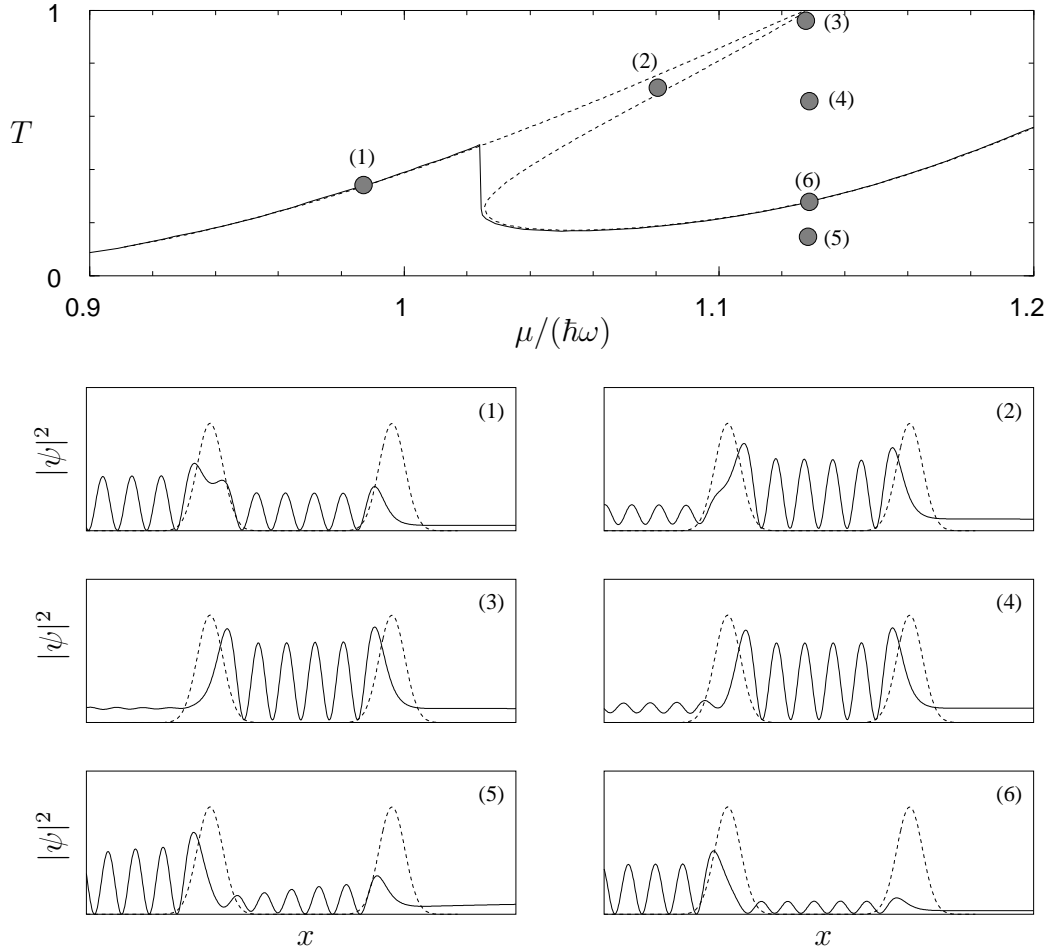
Wir zeigen in diesem Abschnitt, dass die unterdrückten Resonanzen im nichtlinearen Transmissionsspektrum zumindest temporär besetzt werden können, wenn das Doppelbarrierenpotential in geeigneter Weise zeitlich variiert wird. Die grundlegende Idee besteht darin, einen Streuzustand, dessen chemisches Potential sich knapp unterhalb der Stufe im Transmissionsspektrum befindet, adiabatisch entlang des oberen Zweiges der Bistabilitätskurve in einen resonanten Zustand zu überführen. In einem naivem Ansatz könnte man das versuchen, indem man während des Propagationsprozesses adiabatisch das chemische Potential erhöht; dies wäre aber ein reines Gedankenexperiment, das sich auf experimenteller Ebene nur schwer umsetzen ließe. Daher wählen wir eine andere Vorgehensweise.

Anstelle  $\mu$  zu erhöhen, können wir das externe Potential global absenken, was äquivalent zur Erhöhung von  $\mu$  ist. Eine solche Absenkung des Doppelbarrierenpotentials lässt sich zum Beispiel durch eine Illuminierung der gesamten Streuregion mit einem rotverstimmten Laser erreichen. Durch eine Variation der Intensität dieses Laserlichtes kann man die Stärke des dadurch zusätzlich induzierten Potentials  $V$  variieren (vgl. Abschnitt 2.1.2). Damit kann eine zeitabhängige Modulation des Barrierenpotentials von der Form

$$V_{db}(x) \rightarrow V_{db}(x, t) \equiv V_{db}(x) - V(t) \quad (5.26)$$

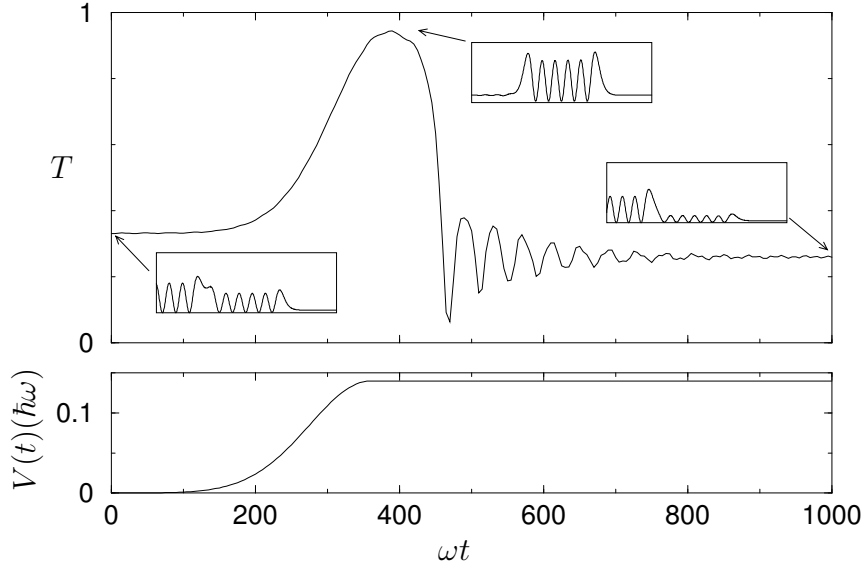
generiert werden. Diese Modulation von  $V_{db}$  ist äquivalent zu einer Verschiebung des chemischen Potentials gemäß der Vorschrift  $\mu \rightarrow \mu + V(t)$ . Variieren wir nun  $V(t)$  adiabatisch in der Zeit, so sollte die Kondensatwellenfunktion  $\psi(x, t)$  zu jeder Zeit  $t$  nahe am augenblicklichen Eigenzustand des Barrierenpotentials bleiben.

Wir untersuchen nun dieses *adiabatische Kontrollschema* an der 6. Resonanz des in Abschnitt 5.2.3 diskutierten experimentell relevanten Beispiels. Die entsprechende Stufe im Transmissionsspektrum ist bei  $\mu = 1.02\hbar\omega$ . Wir populieren zunächst einen stationären Streuzustand bei  $\mu = 0.985\hbar\omega$ , links von der Stufe. In einem zweiten Schritt verschieben wir das effektive chemische Potential von  $\mu = 0.985\hbar\omega$  auf  $\mu + V = 1.125\hbar\omega$ , indem wir das Barrierenpotential während der Zeitintegration der quasi-eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Quellterm adiabatisch absenken. Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  während dieses Prozesses ist in Abb.5.14 illustriert: Wir zeigen Momentaufnahmen der Wellenfunktion zu sechs verschiedenen Zeiten (vgl. Abb.5.14 (1) - (6)); zusätzlich tragen wir die zu diesen Wellenfunktionen gehörenden Transmissionswerte zusammen mit dem bistabilen Transmissionspektrum auf (vgl. graue Punkte in Abb.5.14, oben). Die Momentaufnahme (1) zeigt die Startwellenfunktion, bevor wir beginnen, das Potential  $V_{db}$  abzusenken. Nun senken wir während der



**Abbildung 5.14:** Die Abbildung zeigt sechs Momentaufnahmen der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  während der zeitlichen Variation des Doppelbarrierenpotentials. Die Wellenfunktion geht vom Anfangszustand (1) adiabatisch in einen nahezu resonanten Zustand (3) über, um schließlich wieder zu zerfallen und gegen den Zustand mit kleiner Transmission (6) zu konvergieren. Der obere Teil der Abbildung zeigt die bistabile Transmissionskurve, die grauen Punkte (1) - (6) geben die zu den Momentaufnahmen (1) - (6) zugehörigen Transmissionswerte an.





**Abbildung 5.15:** Zeitentwicklung des Transmissionskoeffizienten (oben) während der adiabatischen Erhöhung des externen Potentials  $V$  (unten), die das effektive chemische Potential von  $\mu = 0.985\hbar\omega$  zu  $\mu = 1.125\hbar\omega$  verschiebt. Die Insets zeigen, dass sich die Wellenfunktion in einen beinahe resonanten Zustand übergeht (mit Transmission nahe eins) und schließlich auf einer Zeitskala von  $\tau \approx 100\omega$  in einen Zustand mit geringer Transmission übergeht.

Zeitspanne  $0 < \omega t < 360$  das Potential langsam ab. Die Momentaufnahme (2) beweist, dass die Wellenfunktion tatsächlich während der Potentialabsenkung der Bistabilitätskurve folgt und die Transmission zunimmt. Schließlich erreichen wir sogar fast den resonanten Zustand (vgl. Momentaufnahme (3)), mit nahezu perfekter Transmission  $T \lesssim 1$ . Wenn wir nun die zeitliche Propagation fortsetzen, ohne dabei das Potential  $V_{ab}$  weiter zu verändern, so stellen wir fest, dass die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  nicht stationär bleibt, sondern eine intrinsische zeitliche Dynamik aufweist; der stationäre Zustand beginnt zu zerfallen (vgl. Momentaufnahmen (4) und (5)), die Transmission nimmt ab. Wenn wir die Propagation genügend lange fortsetzen, konvergiert  $\psi(x, t)$  schließlich gegen den stationären Zustand mit niedrigerer Transmission (Momentaufnahme (6)), den das Transmissionsspektrum neben dem resonanten Zustand bei  $\mu = 1.125\hbar\omega$  besitzt.

Es ist instruktiv, neben den Momentaufnahmen der Abb.5.14 auch den zeitlichen Verlauf der Transmission zu betrachten: Der untere Teil von Abb.5.15 zeigt die zeitliche Änderung von  $V(t)$ , der obere Teil den zeitlichen Verlauf der Transmission. Zunächst ist  $T$  konstant, beginnt dann aber anzuwachsen, sobald  $V(t)$  erhöht wird, um schließlich fast den Transmissionswert eins zu erreichen. Eine weitere Fortführung der Zeitentwicklung zeigt, dass die Transmissionswerte, obwohl nun das Barrierenpotential nicht weiter variiert wird, stark abfallen und

dann ein oszillierendes Verhalten um den Transmissionswert des Zustandes mit kleiner Transmission aufweisen. Führen wir die Zeitentwicklung bis  $t = 1000\hbar\omega$  fort, so konvergieren die Oszillationen gegen diesen kleinen Transmissionswert. In unserer Rechnung kann der beinahe resonante Zustand auf einer Zeitskala von  $\tau \approx 50\omega^{-1} \approx 10\text{ms}$  besetzt werden.

Das wichtige Ergebnis dieser Rechnung ist, dass wir temporär einen fast resonanten Zustand populieren können, dieser aber *dynamisch instabil* ist und deswegen nach kurzer Zeit zu zerfallen beginnt,  $\psi(x, t)$  also eine starke zeitliche Dynamik aufweist und schließlich gegen den Zustand mit geringer Transmission konvergiert. Diese dynamische Instabilität der Zustände, die auf den beiden oberen Zweigen des Spektrums liegen erklärt auch, warum bei einem zeitabhängigen Einschaltvorgang, wo Kondensat in einen anfangs leeren Wellenleiter injiziert wird, immer nur der Zustand mit minimaler Transmission besetzt wird. (Dieses eben beschriebene Verhalten sehen wir auch bei allen anderen von uns betrachteten Doppelbarrierenpotentialen, wie dem Beispiel, das wir in Abschnitt 8.8 untersucht haben).

Obwohl der resonante Zustand dynamisch instabil ist, sollte die Zeitskala von 10ms ausreichend sein, diesen Zustand zum einen experimentell zu detektieren, als auch weitere Manipulationen an diesem Zustand durchzuführen: Zum Beispiel erscheint es uns als eine interessante Option, das Doppelbarrierenpotential nach außen hin zu schließen, indem man Upstream- und Downstream-Region mit einem blauverstimmten Laser illuminiert. Auf diese Weise würde man eine mesoskopische Falle, mit einem ungewöhnlich hoch angeregten *Mean-Field* Kondensatzustand (6. Resonanz, mit fünf Dichteminima) erhalten.

Das in diesem Abschnitt vorgestellte Kontrollschema kann unserer Meinung nach eine wichtige Schaltkomponente in einer zukünftig zu realisierenden komplexen Geometrie von Wellenleiter auf dem Atom Chip werden. Dies ist insbesondere von großer Relevanz für eine mögliche Implementierung von mesoskopischen Systemen, die *Quanten-Computing* mit kalten Atomen und Bose-Einstein-Kondensaten möglich machen sollen [36, 115].

### 5.3 Transport durch Unordnungspotentiale

Wir wenden uns nun dem Transport von Bose-Einstein-Kondensaten durch Unordnungspotentiale zu. Im Gegensatz zu Arbeiten, in welchen die Expansion eines anfänglich ruhenden Kondensats in einem Wellenleiter mit Unordnungspotential untersucht wird [30, 74], wollen wir hier wieder stromtragende Zustände betrachten, wie wir es bereits in den beiden vorausgehenden Abschnitten getan haben, indem wir in der Upstream-Region einen monochromatischen einfallenden Kondensatstrahl mit wohldefinierten Eigenschaften annehmen. Wir untersuchen den

Transport im Folgenden wieder im quasi-eindimensionalen Regime mittels der adiabatischen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_u(x) + g n(x, t) \right) \psi(x, t), \quad (5.27)$$

in einem radialen harmonischem Wellenleiter, der nun zusätzlich ein Unordnungspotential  $V_u(x)$  aufweist. Zudem nehmen wir an, dass die kinetische Energie der Atome im Kondensat größer als die typische Höhe des Unordnungspotentials ist, das heißt, in einem rein klassischen System würde man perfekte Transmission erwarten. Da wir uns konkret für magnetisch induzierte Unordnungspotentiale in Materiewellenleitern interessieren, verwenden wir das in Abschnitt 2.3 entwickelte Unordnungspotential, das die wesentlichen Eigenschaften von Unordnungspotentialen im Kontext von Atom-Chip Experimenten beinhaltet.

Frühere theoretische Studien haben sich vorwiegend mit der Transmission nichtlinearer Wellen mit attraktiver Nichtlinearität ( $g < 0$ ) durch Unordnungsregionen beschäftigt; dabei wurden lediglich stationäre Lösungsmoden der entsprechenden nichtlinearen Wellengleichung untersucht, die Möglichkeit zeitabhängiger Dynamik wurde in diesen Arbeiten explizit ausgeklammert [98]. Des Weiteren ist es wichtig, ob man den Transport als *Fixed input*- oder *Fixed output*-Problem untersuchen will (vgl. Abschnitt 4.2.5). Im zweiten, weniger realitätsnahen, aber dafür einfacher zu behandelnden Fall wurde für attraktive Wechselwirkungen eine algebraische Abnahme der Transmission mit zunehmender Länge der Unordnungsregion gefunden [116]. Eine weitere Studie von Knapp *et al.* [97] zeigt, dass für kurze Längen die Transmission durch die Anwesenheit einer moderaten Nichtlinearität nur schwach beeinflusst wird, wohingegen es für große Längen zu Delokalisierungseffekten kommt.

Wir untersuchen den Transport in dieser Arbeit mit festvorgegebenen Bedingungen für einen einfallenden Strom in der Upstream-Region, und studieren den für Bose-Einstein-Kondensate wichtigen Fall repulsiver Wechselwirkungen. Explizit werden wir Zeitabhängigkeit für die Transportprozesse zulassen. Insbesondere wollen wir auch der Frage nachgehen, inwieweit das für eindimensionale ungeordnete Systeme wohlbekannte Szenario der *Anderson-Lokalisierung* [64] durch eine repulsive interatomare Wechselwirkung beeinflusst wird. Das Phänomen der Anderson-Lokalisierung zeigt sich in wechselwirkungsfreien ( $g = 0$ ), quantenmechanischen Systemen zum einen in einer Lokalisierung der Wellenfunktion, die ausgehend von ihrem Lokalisierungszentrum nach außen hin exponentiell abfällt. Zum anderen manifestiert sie sich bei quantenmechanischem Transport durch einen exponentiellen Abfall der über ein großes Ensemble von Unordnungsrealisierungen gemittelten Transmission

$$\langle T \rangle = \exp \left( -\frac{L}{L_{loc}} \right). \quad (5.28)$$

Hierbei ist  $L_{loc}$  die so genannte *Lokalisierungslänge*, die eine charakteristische Längenskala für die Abnahme der Transmission mit zunehmender Länge  $L$  der Unordnungsregion darstellt.

Wir werden im Folgenden Transport in verschiedenen Regimen der Unordnungsstärke untersuchen; dabei kommt zum einen wieder die in Abschnitt 4.3 entwickelte numerische Methode zum Einsatz, zum anderen werden wir im Regime schwacher Unordnung einen analytischen Zugang aufzeigen. Schließlich diskutieren wir, inwieweit das Anderson-Lokalisierungsszenario, und somit das exponentielle Skalengesetz (5.28), für wechselwirkende ( $g > 0$ ) Systeme noch eine adäquate Beschreibung darstellt. Im Folgenden ist der Wellenleiter wieder längs der  $x$ -Achse ausgerichtet. Die Unordnungsregion der Länge  $L$  befinde sich im Intervall  $0 \leq x \leq L$ ; der Bereich  $x < 0$  wird wieder mit Upstream-Region, der Bereich  $x > L$  mit Downstream-Region bezeichnet.

### 5.3.1 Schwache Unordnungspotentiale

In diesem Abschnitt untersuchen wir das Regime schwacher Unordnungspotentiale und leiten analytisch Zusammenhänge zwischen der Dichte des Bose-Einstein-Kondensats und dem Unordnungspotential  $V_u(x)$  her. Unter *schwacher Unordnung* verstehen wir das Regime, in dem das Kondensat während der Propagation nur marginal vom Unordnungspotential beeinflusst wird. Dies impliziert, dass die kinetische Energie pro kondensiertem Atom wesentlich größer sein muss, als die typische Potentialhöhe von  $V_u(x)$  (diese Potentialhöhe kann durch die Standardabweichung  $\langle V_u^2(x) \rangle^{1/2}$  abgeschätzt werden; zur Berechnung der Standardabweichung wird über ein Ensemble von Unordnungsrealisierungen gemittelt). Wir werden später sehen, dass ein zweites Kriterium zur Charakterisierung des Regimes schwacher Unordnung notwendig ist, nämlich, dass die Länge  $L$  der Unordnungsregion klein gegenüber einer noch zu definierenden Längenskala  $L_d$  sein muss. Wir verwenden die hydrodynamische Darstellung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (vgl. Abschnitt 3.3.1), welche wie folgt lautet

$$\frac{\partial}{\partial t}n = -\frac{\partial}{\partial x}(nv) \quad (5.29)$$

und

$$m\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\hbar^2 m}{2n^{1/2}} \frac{\partial^2 n^{1/2}}{\partial x^2} - \frac{mv^2}{2} - V_u(x) - gn \right]. \quad (5.30)$$

Hierbei ist  $v$  die Geschwindigkeit des Kondensats. Im Falle eines stationären Zustandes gilt  $\partial_t n = 0$  und  $\partial_t v = 0$ , woraus wir folgern, dass der Strom des Kondensats  $j = nv$  konstant ist. Integriert man dann Gleichung (5.30), so findet man

$$\mu = V_u(x) + gn + \frac{mj^2}{2n^2} - \frac{\hbar^2}{2mn^{1/2}} \frac{\partial^2 n^{1/2}}{\partial x^2}. \quad (5.31)$$

Dies ist die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung für einen stromtragenden Zustand.

In der Downstream-Region erwarten wir gemäß Abschnitt 4.2.2 eine auslaufende ebene Welle der Form  $\psi(x) = \sqrt{n_0} e^{ikx}$ . Die Gleichgewichtsdichte  $n_0$  koinzidiert wieder mit der *Überschalllösung* der Dispersionsrelation (3.77) für eine ebene Welle (es gilt also  $n_0 \equiv n_1$ ). Definieren wir nun die Größen  $\rho(x) \equiv n(x)/n_0$  und  $u(x) \equiv 2mV_u(x)/(\hbar^2 k^2)$  so können wir (5.31) in der Form

$$-\frac{1}{\rho^{1/2}} \frac{\partial^2 \rho^{1/2}}{\partial x^2} + \frac{\rho - 1}{\xi^2} + k^2 \left[ \frac{1}{\rho^2} - 1 + u(x) \right] = 0. \quad (5.32)$$

schreiben. Hierbei haben wir die Dispersionsrelation (3.77) verwendet und drücken  $j = n_0 \hbar k / m$  mittels der Downstream Dichte  $n_0$  aus ( $k$  ist der Wellenvektor der auslaufenden ebenen Welle). Die Größe  $\hbar^2 k^2 / (2m) = \mu - g n_0$  ist die kinetische Energie der auslaufenden Welle mit Gleichgewichtsdichte  $n_0$ .  $\xi = \hbar / \sqrt{2m n_0 g}$  ist die *Healing Length* des Kondensats mit Dichte  $n_0$ .

Um störungstheoretisch eine Lösung für die Differentialgleichung (5.32) zu finden, verwenden wir den Ansatz  $\rho(x) = 1 + \delta\rho(x)$ . Wir setzen dies in (5.32) ein, und berücksichtigen nur Terme, die linear in  $\delta\rho(x)$  sind und finden damit

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta\rho(x) + 4\kappa^2 \delta\rho(x) = 2k^2 u(x), \quad (5.33)$$

wobei  $\kappa$  durch

$$\kappa = k \sqrt{1 - \frac{1}{2\xi^2 k^2}} \quad (5.34)$$

definiert ist. Die Lösung von (5.33) ist unter Berücksichtigung der Randbedingungen  $\delta\rho(L) = 0$ ,  $\delta\rho'(L) = 0$  (konstante Dichte in der Downstream-Region) durch

$$\begin{aligned} \delta\rho(x) &= \frac{k^2}{\kappa} \int_x^L \sin[2\kappa(x' - x)] u(x') dx', \\ \delta\rho'(x) &= -2k^2 \int_x^L \cos[2\kappa(x' - x)] u(x') dx' \end{aligned} \quad (5.35)$$

gegeben. (Dies sieht man sofort, wenn man sich klar macht, dass (5.33) die wohl-bekannte Bewegungsgleichung eines getriebenen harmonischen Oszillators darstellt, und somit mittels der Greenschen Funktion eines klassischen harmonischen Oszillators gelöst werden kann [96]). Dies impliziert, dass das Dichteprofil in der Upstream-Region ( $x < 0$ ), das wir durch Lösen der Gleichung (5.33) erhalten, von der Form  $n(x) = n_0 [1 + \delta\rho(x)]$  ist, mit

$$\delta\rho(x) = \delta\bar{\rho} \cos(2\kappa x + \theta). \quad (5.36)$$

Die Amplitude  $\delta\bar{\rho}$  und der Phasenfaktor  $\theta$  sind durch das Potential  $V_u(x)$  über die Gleichungen (5.35) bestimmt. Die modifizierte Wellenzahl  $\kappa$  bestimmt die Periode der Dichteoszillationen in der Upstream-Region.

Da wir uns offensichtlich im Regime schwacher Rückreflexionen bewegen, können wir zur Bestimmung der Transmissions- und Reflexionskoeffizienten die in Abschnitt 4.2.3 beschriebene Näherungsmethode verwenden. Wir zerlegen also die Wellenfunktion in der Upstream-Region in eine einlaufende und reflektierte Komponente und schreiben  $n(x) = |\psi_{\text{inc}}(x) + \psi_{\text{ref}}(x)|^2$  mit

$$\begin{aligned}\psi_{\text{inc}}(x) &= a \exp\{i\kappa x\}, \\ \psi_{\text{ref}}(x) &= b \exp\{i(\kappa x + \theta)\}.\end{aligned}\quad (5.37)$$

Vergleichen wir dies mit dem Dichteprofil in Gleichung (5.36), so erhalten wir folgende approximative Ausdrücke für die Amplituden  $a$  und  $b$  in (5.37):

$$\begin{aligned}\frac{a^2}{n_0} &= 1 - \frac{1}{4}\delta\bar{\rho}^2 + \mathcal{O}(\delta\bar{\rho}^4), \\ \frac{b^2}{n_0} &= \frac{1}{4}\delta\bar{\rho}^2 + \mathcal{O}(\delta\bar{\rho}^4).\end{aligned}\quad (5.38)$$

Der Reflexionskoeffizient  $R$  ist dann durch

$$R = b^2/a^2 = \frac{1}{4}\delta\bar{\rho}^2 + \mathcal{O}(\delta\bar{\rho}^4) \quad (5.39)$$

gegeben (vgl. (4.31)), und der Transmissionskoeffizient lautet, wenn wir das Ergebnis (5.35) verwenden

$$T = 1 - \frac{1}{4}\delta\bar{\rho}^2 = 1 - \frac{1}{4} \left\{ [\delta\rho(0)]^2 + \frac{1}{4\kappa^2} [\delta\rho'(0)]^2 \right\}, \quad (5.40)$$

(vgl. (4.31)). In diesem Ausdruck sind  $\delta\rho(0)$  und  $\delta\rho'(0)$  mit dem Unordnungspotential über (5.35) verknüpft. Deswegen müssen zur Berechnung von  $T$  die Integralausdrücke (5.35) ausgewertet werden.

Wir zeigen in Anhang 8.4, dass wir damit die über ein Ensemble von verschiedenen Unordnungsrealisierungen gemittelte Transmission  $\langle T \rangle$  erhalten, wenn wir die Korrelationsfunktion des Unordnungspotentials kennen. Wenn wir das in Abschnitt 2.3.1 eingeführte Lorentzkorrelierte, magnetisch induzierte Unordnungspotential betrachten (mit Korrelationsfunktion (2.38)), finden wir das Ergebnis

$$\langle T \rangle = 1 - \frac{L}{L_d}, \quad (5.41)$$

wobei

$$L_d = \frac{\hbar^4 \kappa^2}{\pi \gamma m^2} e^{2\kappa l_c} \quad (5.42)$$

die charakteristische Längenskala für den Abfall der gemittelten Transmission  $\langle T \rangle$  ist.

Wir rufen hier in Erinnerung, dass das Ergebnis (5.41,5.42) nur dann gültig ist, wenn  $\delta\bar{p} \ll 1$  gilt. Das heißt, der lineare Abfall von  $\langle T \rangle$  in (5.41) ist nur im Regime  $L \ll L_d$  korrekt. Daher müssen wir unsere Definition von *schwacher Unordnung* präzisieren: Es muss nicht nur sichergestellt sein, dass die kinetische Energie des Kondensats viel größer als die mittlere Potentialhöhe ist, sondern zugleich darf die Länge  $L$  der Unordnungsregion die Länge  $L_d$  nicht überschreiten. Wie wir anhand von (5.42) sehen, ist der Effekt der Atom-Atom Wechselwirkung vollständig in der modifizierten Wellenzahl  $\kappa$  (5.34) enthalten, die die Dichteoszillationen in der Upstream-Region beschreibt. Für eine repulsive Wechselwirkung ( $g > 0$ ) finden wir  $\kappa < k$ , was zur Folge hat, dass im Gegensatz zum wechselwirkungsfreien Fall die Transmission reduziert ist.

Im Grenzfall sehr kleiner Korrelationslängen  $l_c$ , dieses Regime wird durch  $\kappa l_c \ll 1$  definiert, kann das eigentlich Lorentzkorrelierte Unordnungspotential durch ein  $\delta$ -korreliertes Potential mit Korrelationsfunktion  $C(x-x') \simeq \gamma\pi\delta(x-x')$  (*weißes Rauschen*) genähert werden. Betrachtet man dann den wechselwirkungsfreien Fall (es gilt dann  $\kappa = k$ ), finden wir in diesem Regime den wohlbekannten Zusammenhang

$$L_d = L_{loc} \equiv \frac{\hbar^4 k^2}{\pi m^2 \gamma} \quad (5.43)$$

für die Lokalisierungslänge von Materiewellen, die der linearen Schrödingergleichung gehorchen, in einem  $\delta$ -korrelierten Potential wieder (vgl. z.B [117]).

Wir wollen nun den zum Limes weißen Rauschens entgegengesetzten Grenzfall mit  $\kappa l_c \gg 1$  betrachten. Diesen Grenzfall bezeichnen wir als *semiklassisches Regime*, da dort die de Broglie Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/k$  des ungestörten Kondensats viel kleiner als die Korrelationslänge  $l_c$  des Unordnungspotentials ist. In diesem Regime wird die Länge  $L_d$  hauptsächlich durch den Exponentialfaktor  $\exp(2\kappa l_c)$  bestimmt, und Abweichungen von der perfekten Transmission  $\langle T \rangle = 1$  nehmen mit zunehmendem  $\kappa l_c$  exponentiell ab. Im semiklassischen Regime können wir rekursiv einen Ausdruck für die Dichte  $n(x)$  in der Unordnungsregion herleiten. Wir beginnen mit der Lösung nullter Ordnung  $n(x) = n_0$ , die exakt für den Fall  $V_u(x) \equiv 0$  gültig ist. Dann können wir für einen gegebenen Strom  $j$  und festes chemisches Potential  $\mu$  die Dichte  $n_0$  durch iteratives Lösen der selbstkonsistenten Gleichung (die exakt äquivalent zur Dispersionsrelation (3.77) ist)

$$n_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} j [\mu - g n_0]^{-\frac{1}{2}} , \quad (5.44)$$

finden. (Als Startwert für die Rekursionsprozedur verwenden wir die eindeutig bestimmte Dichte  $n_0 = j\sqrt{m/(2\mu)}$  der ebenen Welle nichtwechselwirkender Atome). Dieses rekursive Vorgehen stellt Konvergenz gegen die *Überschalllösung*

der Dispersionsrelation (3.77) sicher. Eine natürliche Erweiterung der Gleichung (5.44) für den Fall eines kleinen, aber nicht verschwindenden Unordnungspotentials  $V_u(x)$  erhält man, indem wir Anstelle von (3.77) die Gleichung (5.31) verwenden. Dies führt zu

$$n = n_0 \left[ -\frac{V_u(x)}{\mu - gn_0} + \frac{\mu - gn + \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{n}}{\mu - gn_0} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.45)$$

wobei der Strom  $j$  unter Verwendung der Dispersionrelation (3.77) substituiert wurde. Wir wollen nun eine Näherungslösung dieser selbstkonsistenten Gleichung im Regime schwacher Unordnung  $|u(x)| \ll 1$  finden, wobei die typischen Werte von  $V_u$  viel kleiner als die kinetische Energie  $E_{kin} = \mu - gn_0$  sein sollen. Wir betonen aber, dass dies nicht bedeutet, dass der nichtlineare Term  $gn_0$  klein zu sein braucht.

Wie bereits erwähnt, ist die Lösung nullter Ordnung in  $u(x)$  einfach die Gleichgewichtsdichte  $n_0$  in Abwesenheit des Unordnungspotentials. Setzen wir diese konstante Lösung wieder in die Rekursionsrelation (5.45) ein, so finden wir folgende Näherungslösung erster Ordnung in  $u(x)$  für die Kondensatdichte im Wellenleiter

$$n^{(1)}(x) = \frac{n_0}{\sqrt{1 - u(x)}}. \quad (5.46)$$

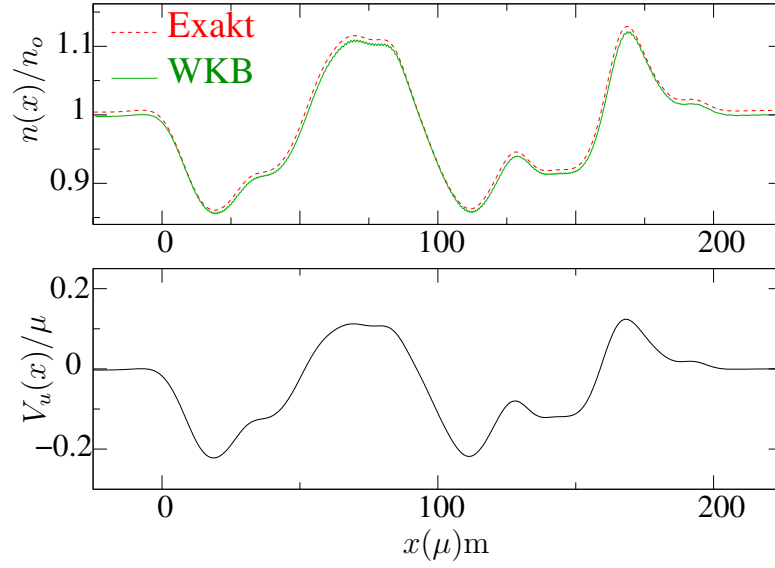
Korrekturen zu dieser Näherung kommen im Wesentlichen vom Quantendruckterm

$$\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (5.47)$$

in der hydrodynamischen Gleichung (5.30). Indem wir  $n^{(1)}(x)$  wieder in (5.45) einsetzen, kann aber gezeigt werden, dass der Quantendruckterm mit einem Faktor  $\sim 1/(kl_c)^2$ , verglichen zur kinetischen Energie  $\hbar^2 k^2/(2m)$ , unterdrückt wird. Somit wird im Regime  $\kappa l_c \gg 1$  der Quantendruckterm vernachlässigbar klein, und das Ergebnis (5.46) stellt eine sehr gute Näherung für die tatsächliche Dichte  $n(x)$  im Wellenleiter mit schwachem Unordnungspotential dar. Es sei hier erwähnt, dass dieses Resultat (5.46) auch mittels eines semiklassischen WKB-Ansatzes hergeleitet werden kann (siehe Anhang 8.5). Wir nennen darum (5.46) auch WKB-Lösung

Wir illustrieren das Resultat (5.46) in Abb.5.16. Der untere Teil der Abbildung zeigt ein Unordnungspotential, das mit dem Modell aus Abschnitt 2.3.1 generiert wurde. Der obere Teil der Abbildung zeigt den Vergleich zwischen dem Resultat der Näherungsformel (5.46) und einer numerisch errechneten exakten Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung. Wir finden eine äußerst gute Übereinstimmung zwischen der Näherungsformel und dem exakten Verlauf der Dichte  $n(x)$ .





**Abbildung 5.16:** Der obere Teil der Abbildung zeigt einen Vergleich der WKB - Lösung (5.46) mit einer numerisch errechneten exakten Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein schwaches Unordnungspotential  $V_u(x)$  (aufgetragen im unteren Teil der Abbildung). Die Korrelationslänge ist  $l_c = 30\mu\text{m}$  und die Wellenlänge ist  $\lambda = 3\mu\text{m}$ . Das Verhältnis zwischen Wechselwirkungsenergie und kinetischer Energie beträgt für die Gleichgewichtsdichte  $n_0$  hier  $E_{int}/E_{kin} = 1/10$ .

Am Ende dieses Abschnitts wollen wir zeigen, dass die Näherungsformel (5.46) von großer Relevanz für die gegenwärtig experimentell untersuchten ungeordneten Wellenleitersysteme auf Atomchips sein dürfte: Typischerweise liegen bei solchen Experimenten die Abstände  $h$  zwischen Chipoberfläche und Wellenleiter im Bereich von  $20 - 100\mu\text{m}$ . Die Korrelationslängen der Unordnungspotentiale, die aus Fragmentierungsexperimenten [44, 77] (vgl. auch Abschnitt 2.3) abgeschätzt werden können, sind von der selben Größenordnung wie  $h$ . In vor kurzen mit einem Bose-Einstein-Kondensat durchgeführten Transportexperimenten [118] lag die Geschwindigkeit des Kondensats bei wenigen Millimetern pro Sekunde, was einer de Broglie Wellenlänge von einigen Mikrometern entspricht. Das heißt, diese Experimente werden somit im Regime  $\kappa l_c \gg 1$  durchgeführt, was gemäß Gleichung (5.42) zu einem sehr großen Wert für die Länge  $L_d$  führt. Somit ist das Regime schwacher Unordnung, mit im Vergleich zur de Broglie Wellenlänge großen Korrelationslängen  $l_c$ , für die gegenwärtig durchgeführten Experimente von besonders großer Relevanz. Ist also die kinetische Energie viel größer als die typische Höhe des Unordnungspotentials und ist zudem  $L_d$  groß (verglichen mit der Länge  $L$  der Unordnungsregion) so erwarten wir eine nahezu perfekte Transmission.

### 5.3.2 Moderate und starke Unordnungspotentiale

Im letzten Abschnitt haben wir den Fall schwacher Unordnungspotentiale betrachtet und den Transport im Regime  $\mu \gg \langle V_u^2(x) \rangle^{1/2}$  und  $L \ll L_d$  untersucht. In diesem Abschnitt werden wir die erste dieser Ungleichung noch teilweise erfüllen, aber die zweite Einschränkung,  $L \ll L_d$ , fallen lassen. Wir werden zeigen, dass dann neuartige Effekte auftreten; unter anderem wird zeitabhängige Dynamik eine dominante Rolle spielen.

Wir verwenden im Folgenden die in Abschnitt 4.3 eingeführte numerische Methode, die darauf beruht, die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung in Anwesenheit eines Quellterms zu integrieren. Auf diese Art und Weise können wir zum einen feststellen, ob ein stationärer Streuzustand besetzt wird, wenn eine monochromatische Materiewelle in einen Wellenleiter mit Unordnungspotential injiziert wird; zum anderen können wir Transmissionswerte für den Transport eines Kondensats durch Unordnungspotentiale berechnen (vgl. Abschnitt 4.3.4). Da wir statistische Aussagen über die Transmission eines monochromatischen Kondensatflusses durch Unordnungsregionen machen wollen, genügt es nicht, eine einzelne Unordnungsrealisierung zu untersuchen, sondern wir betrachten ein Ensemble von  $N$  Unordnungsrealisierungen mit zufällig verteilten Längen  $L$ , die alle mit gleicher Wahrscheinlichkeit zwischen  $L=0$  und einer Maximallänge  $L_{max}$  verteilt seien. Die Unordnungspotentiale sind wieder Lorentzartig korreliert und werden numerisch mit dem Unordnungsmodell aus Abschnitt 2.3.1 generiert. Für jede Unordnungsrealisierung (nummeriert mit dem Index  $\alpha$ ) simulieren wir numerisch die Zeitentwicklung der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  und extrahieren daraus entweder die zeitunabhängige Transmission  $T_\alpha$  (4.95) (wenn  $\psi(x, t)$  gegen einen stationären Streuzustand konvergiert) oder die zeitgemittelte Transmission  $\bar{T}_\alpha$  (4.97) (wenn  $\psi(x, t)$  zeitabhängig bleibt). Wir diskutieren im folgenden ein Beispiel für Transport durch ein Ensemble von Unordnungsregionen, das die wesentlichen Eigenschaften des Systems verdeutlicht, wenn wir uns im Regime moderater, oder starker Unordnungspotentiale befinden, und  $l_c$  von der gleichen Größenordnung wie  $\lambda$  ist.

Wir betrachten dazu in den folgenden numerischen Rechnungen immer den experimentell besonders wichtigen Fall von  $^{87}\text{Rb}$  Atomen (Streulänge  $a_s = 5.77\text{nm}$ ). Die Rechnungen wurden für einen Wellenleiter mit radialer Fallenfrequenz  $\omega = 2\pi \times 100 \text{ s}^{-1}$  ausgeführt (das entspricht einer Oszillatorlänge  $a_\perp = 1\mu\text{m}$ ). Um das Regime starker Unordnung zu erreichen, wählen wir mit  $h = 5\mu\text{m}$  einen relativ kleinen Abstand zwischen Wellenleiter und Chipoberfläche. Dadurch erreichen wir eine kleine Unordnungskorrelationslänge,  $l_c = 6\mu\text{m}$ . Um Anregungen des Kondensates in höhere Transversalmoden zu unterbinden, adjustieren wir die Standardabweichung des Unordnungspotentials (welche ein Maß für die mittlere Stärke des Potentials darstellt) auf den Wert  $\langle V_u^2(x) \rangle^{1/2} \simeq 0.12 \hbar\omega$ . In den folgenden numerischen Rechnungen betrachten wir einen Strom von  $j = 10^3$  Ato-

men pro Sekunde und nehmen eine de Broglie Wellenlänge  $\lambda = 10\mu\text{m}$  an. Damit befinden wir uns weit weg vom semiklassischen Regime, da  $\lambda$  und  $l_c$  nun von der gleichen Größenordnung sind. Das chemische Potential hat dann den Wert  $\mu = 0.25 \hbar\omega$  (im linearen Fall,  $g = 0$ , nimmt das chemische Potential den davon leicht verschiedenen Wert  $\mu = 0.23 \hbar\omega$  an).

Wir beginnen unsere Betrachtungen mit dem linearem Fall  $g = 0$ , der bereits intensiv im Kontext von Lokalisierungseffekten untersucht worden ist [98, 117]. Im lokalisierten Regime fällt die Transmission exponentiell mit zunehmender Systemlänge  $L$  (das ist die Länge der Unordnungsregion) ab,  $\langle T \rangle = \exp(-L/L_{loc})$ ; dabei ist  $L_{loc}$  die so genannte *Lokalisierungslänge*. Kommen wir nun zu den numerischen Ergebnissen für den linearen Fall. Die Punkte in Abb.5.17 geben für jede Unordnungsrealisierung den zugehörigen Transmissionswert  $T_\alpha(L)$  als Funktion der Länge  $L$  der Unordnungsregion an. Um aus diesen Daten ein charakteristisches Skalengesetz für die Längenabhängigkeit der Transmission zu extrahieren, teilen wir die Ordinate (dort ist  $L$  aufgetragen) in kleine, gleichgroße Intervalle der Länge  $\Delta L \ll L$  auf. Wir berechnen dann die gemittelte Transmission bei der Länge  $L$ , indem wir alle Werte  $T_\alpha(L)$  aufsummieren, die in einem Intervall der Breite  $\Delta L$  liegen, das bei der Länge  $L$  zentriert ist:

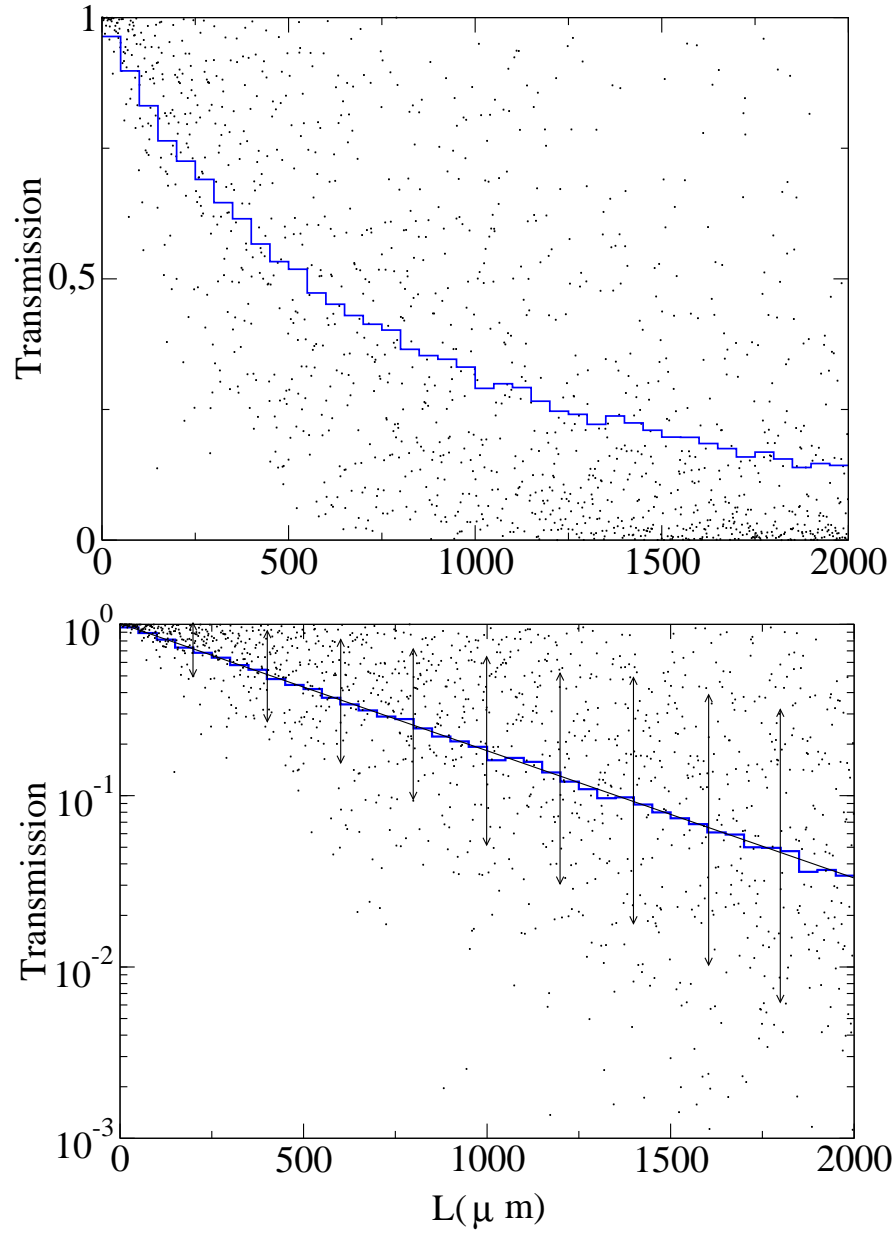
$$\langle T \rangle_a(L) = \frac{1}{N_L} \sum_{\alpha}^{N_L} T_\alpha(L'), \text{ mit } L - \frac{\Delta L}{2} < L' < L + \frac{\Delta L}{2}. \quad (5.48)$$

$N_L$  ist die Anzahl der Unordnungsrealisierungen, die in einem betrachteten Intervall liegen. Mit  $\langle T \rangle_a(L)$  bezeichnen wir die arithmetisch gemittelte Transmission. Die Stufenfunktion im oberen Teil von Abb.5.17 zeigt die Abnahme von  $\langle T \rangle_a$  für 30000 Unordnungsrealisierungen und eine Intervalllänge  $\Delta L = 50\mu\text{m}$  (der Übersichtlichkeit wegen, zeigen wir in der Abbildung lediglich 2000 Punkte).

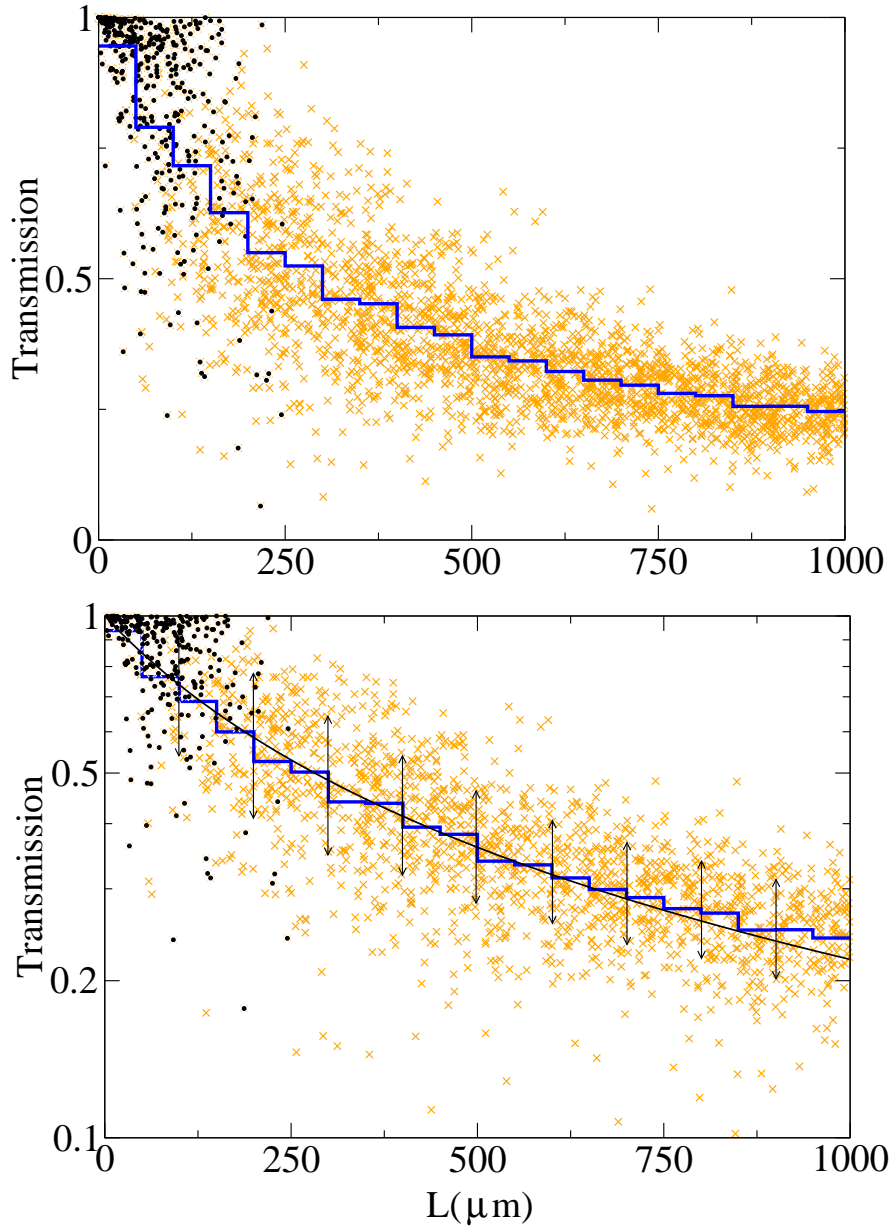
Im Kontext von Lokalisierungseffekten hat es sich als vorteilhaft erwiesen, Skalengesetze mittels der geometrisch gemittelten Transmission zu untersuchen

$$\langle T \rangle_g = e^{\langle \ln(T) \rangle}, \quad \langle \ln(T) \rangle = \frac{1}{N_L} \sum_{\alpha}^{N_L} \ln(T_\alpha(L')), \quad (5.49)$$

da im Gegensatz zu  $\langle T \rangle_a$  das Mittel  $\langle \ln(T) \rangle_g$  eine selbstmittelnde Größe des Systems ist [117, 119]. Betrachtet man nämlich quantenmechanisch die Streuung von Materiewellen, die der linearen Schrödingergleichung gehorchen, an einer Serie von Streubarrieren, so lässt sich zeigen, dass im geometrischen Mittel die Transmission exponentiell abnimmt [119, 120]. Für das arithmetische Mittel gilt diese Aussage nur im Regime sehr langer Unordnungsrealisierungen und sehr kleiner Streupotentiale [117]. Der untere Teil von Abb.5.17 zeigt  $\langle T \rangle_g$ , welches eindeutig einem exponentiellen Verlauf folgt. Dies ist ein klarer Beleg für das Auftreten von *Lokalisierung*. Wir können aus unseren Daten auch die Lokalisierungslänge extrahieren, welche hier den Wert  $L_{loc} = 586\mu\text{m}$  hat. Wir weisen auf die sehr breite



**Abbildung 5.17:** Transmission durch Unordnungsregionen als Funktion der Länge  $L$  der Unordnungsregion, für den Fall nichtwechselwirkender Atome. Jeder der Punkte gibt die Transmission für eine Unordnungsrealisierung an. Oben: Arithmetisch gemittelte Transmission (Stufenfunktion). Unten: Die geometrisch gemittelte Transmission fällt exponentiell mit zunehmendem  $L$  ab. Der Fit (gerade Linie) an das Skalengesetz  $\langle T \rangle = \exp(-L/L_{loc})$  ergibt  $L_{loc} = 586\mu m$ . Die Pfeile geben die logarithmische Standardabweichung an.



**Abbildung 5.18:** Transmission durch ein Ensemble von Unordnungsrealisierungen für eine moderate Nichtlinearität mit  $E_{int}/E_{kin} = 1/10$ . Die schwarzen Punkte geben die Transmission für den Fall an, dass stationäre Zustände besetzt werden. Die orangen Kreuze zeigen die zeitlich gemittelten Transmissionen für den Fall zeitabhängiger Dynamik der Wellenfunktion. Es findet ein Übergang von vorwiegend zeitunabhängigem zu zeitabhängigem Verhalten des Systems in der Umgebung der kritischen Länge  $L^* \approx 125 \mu\text{m}$  statt. Die Stufenfunktionen zeigen zum einen die arithmetisch gemittelte Transmission  $\langle T_a \rangle$  (oben) und die geometrisch gemittelte Transmission  $\langle T_g \rangle$  (unten).  $\langle T_g \rangle$  wird gut durch ein algebraisches Skalierungsgesetz der Form  $L_0/(L + L_0)$  approximiert (durchgezogene schwarze Linie); in unserem Beispiel finden wir  $L_0 = 287 \mu\text{m}$ .

Verteilung der Datenpunkte um ihr geometrisches Mittel hin. Diese Verteilung kann quantitativ durch die logarithmische Standardabweichung

$$\Delta \ln(T) = \left[ \sqrt{\frac{1}{N_L} \sum_{\alpha} [\ln(T_{\alpha}) - \langle \ln(T) \rangle]^2} \right] \quad (5.50)$$

erfasst werden, die im unteren Teil der Abb.5.17 aufgetragen ist. Wir finden ein fast perfektes lineares Anwachsen der Größe  $\Delta \ln(T)$  mit zunehmender Länge  $L$ .

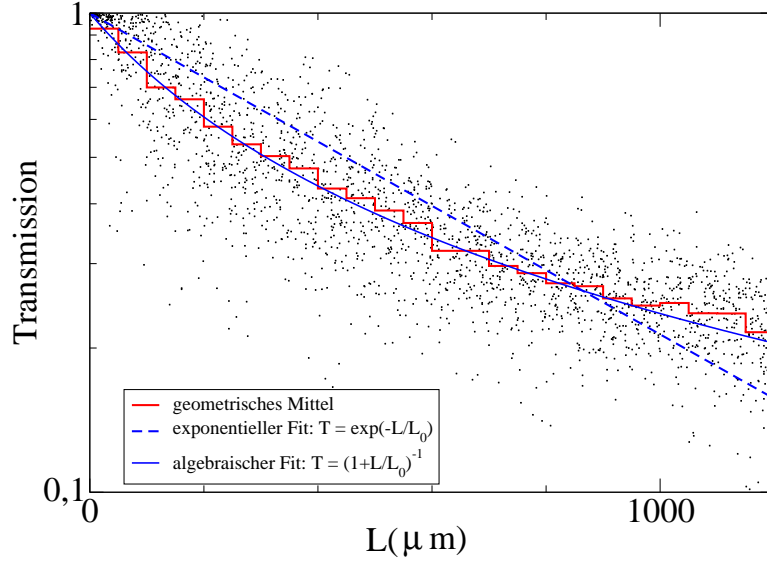
In diesem Zusammenhang tritt nun natürlich die Frage auf, ob diese Art von Lokalisierungsphänomen, mit der charakteristischen exponentiellen Abnahme der Transmission, auch im Falle von wechselwirkenden Atomen auftritt. Um diese Frage zu beantworten, berechnen wir nun den Transport in Anwesenheit einer moderaten Nichtlinearität, wobei wir das Verhältnis von kinetischer und Wechselwirkungsenergie im einfallenden Kondensatstrahl auf den Wert  $E_{int}/E_{kin} = 1/10$  festlegen.

Im Gegensatz zum linearen Fall, wo immer ein stationärer Streuzustand in der Unordnungsregion besetzt werden kann, wird für  $g > 0$  *zeitabhängiges* Verhalten eine dominante Eigenschaft des Systems. Wie in Abb.5.18 gezeigt ist, werden dynamisch stabile Streuzustände (schwarze Punkte in Abb.5.18) nur für Unordnungsregionen besetzt, deren Länge kleiner als eine kritische Länge  $L^*$  ist (in unserer Rechnung ist  $L^*$  ungefähr  $125\mu\text{m}$ ). Für Unordnungsrealisierungen mit Länge  $L \approx L^*$  finden wir eine Übergangsregion, wo zeitabhängiges Verhalten einsetzt, und Konvergenz der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  gegen einen dynamisch stabilen, stationären Streuzustand nur noch für einen kleinen Bruchteil der betrachteten Unordnungsrealisierungen erreicht wird. Die Wellenfunktion bleibt immer zeitabhängig, wenn wir ein Regime erreicht haben, wo  $L$  wesentlich größer als  $L^*$  ist. Wenn  $\psi(x, t)$  zeitabhängig bleibt (in der Abbildung durch orange Kreuze markiert), berechnen wir für diese Unordnungsrealisierungen die zeitlich gemittelte Transmissionen  $\bar{T}_{\alpha}$ .

Um nun wieder ein Skalengesetz aus dem Datensatz zu extrahieren, berechnen wir wieder die über das Ensemble von Unordnungsrealisierungen gemittelte Transmission  $\langle T \rangle$ ; hierbei ersetzen wir, für den Fall, dass die Wellenfunktionen  $\psi(x, t)$  zeitabhängig bleiben, in den Gleichungen (5.48)-(5.50) die Größe  $T_{\alpha}$  durch  $\bar{T}_{\alpha}$ . Wir finden, dass die geometrisch gemittelte Transmission  $\langle T \rangle_g$  (Stufenfunktion im unteren Teil der Abb.5.18) invers mit zunehmender Länge  $L$  abnimmt und sehr gut durch die algebraische Funktion

$$\langle T \rangle_g = \frac{L_0}{L + L_0} \quad (5.51)$$

approximiert wird (durchgezogene schwarze Linie in Abb.5.18).  $L_0$  ist dabei die charakteristische Längenskala, auf der  $\langle T \rangle_g$  abfällt. Um zu zeigen, dass die geome-



**Abbildung 5.19:** Die geometrisch gemittelte Transmission  $\langle T \rangle_g$  folgt im nichtlinearen Fall eindeutig dem algebraischem Skalengesetz, nicht aber einem exponentiellem Verlauf; die Parameter des hier betrachteten Systems sind die selben, wie in Abb.5.18 (Der Übersichtlichkeit halber verzichten wir in dieser Abbildung auf die farbliche Unterscheidung zwischen stationären und zeitabhängigen Transportprozessen).

trisch gemittelte Transmission eindeutig nicht dem exponentiellen Verlauf, sondern dem algebraischem Skalengesetz folgt, zeigen wir in Abb.5.19 noch einmal  $\langle T \rangle_g$ , den Fit der Datenpunkte an eine Exponentialfunktion und an die algebraische Funktion (5.51); nur mit letzterem stimmt  $\langle T \rangle_g$  gut überein.

Das algebraisches Skalengesetz ist charakteristisch für Transport in Systemen, in welchen es zu einem Verlust an Phasenkohärenz zwischen einzelnen Streueignissen kommt. Betrachtet man zum Beispiel ein eindimensionales System mit einer Reihe von aufeinanderfolgenden Streueignissen und berechnet Transmissionswerte für solch ein System unter Vernachlässigung aller Phaseninformationen, so findet man für die Transmission exakt das Skalengesetz (5.51) [49, 120]. Eine andere augenfällige Eigenschaft ist die Verteilung der Datenpunkte in Abb.5.18. Im Gegensatz zum linearen Fall ist die Verteilung der Punkte nun deutlich auf das Gebiet um den Transmissionsmittelwert eingeschränkt, und die logarithmische Standardabweichung nimmt mit zunehmender Länge  $L$  ab. Daher kann man erwarten, die Transmissionen  $\bar{T}_\alpha$  im Regime großer Längen  $L$  in einem engen Intervall um den Mittelwert zu finden, das heißt,  $\bar{T}_\alpha$  wird mehr oder weniger unabhängig von der konkreten Form der Unordnungsrealisierung.

Da die Berechnung der hier gezeigten Ergebnisse einen sehr hohen numerischen Aufwand erfordert, sind wir zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht in der Lage, weitere quantitative Angaben zur kritischen Länge  $L^*$ , die den Übergang von

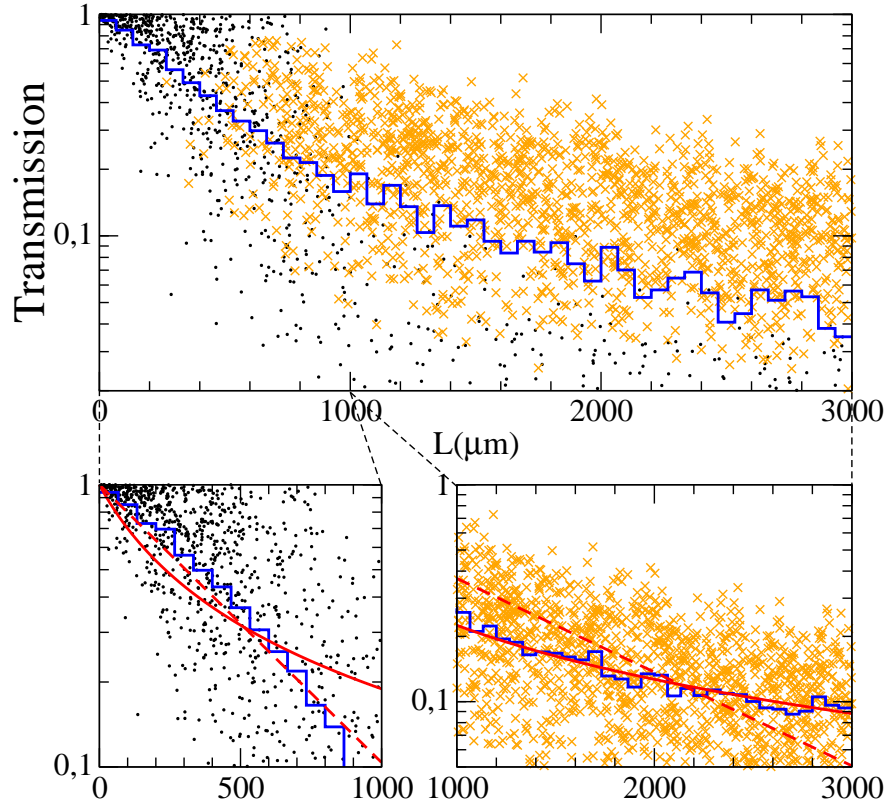
zeitunabhängigen zu zeitabhängigen Verhalten markiert, zu machen. Wir haben aber weitere numerische Rechnungen durchgeführt, die folgende qualitative Aussagen über das System erlauben; aus Platzgründen zeigen wir die Ergebnisse dieser Rechnungen nicht in grafischer Darstellung; sie haben aber alle die gleichen qualitativen Eigenschaften, wie sie bei dem Datensatz in Abb.5.18 gefunden werden. Generell kann man aussagen, dass eine Erhöhung des Wechselwirkungsparameters  $g$ , oder eine Erhöhung der Unordnungspotentialhöhe zu einer Verschiebung von  $L^*$  zu kleineren Werten von  $L$  führt. Dies ist der Grund, warum stationäre Streuzustände nur für kleine Längen  $L$  populiert werden. Das gleiche Verhalten beobachtet man auch dann, wenn man das Verhältnis  $\lambda/l_c$  vergrößert. Diese Beobachtungen deuten auf die Existenz einer kritischen Nichtlinearität  $g^*$  hin, jenseits derer das System nur noch zeitabhängige Transportprozesse zulässt. In der Tat zeigen vorläufige Untersuchungen, dass für jede Unordnungsrealisierung der Länge  $L$  ein kritischer Wert  $g^*$  existiert, von dem an keine stationären Streuzustände mehr besetzt werden. Äquivalent dazu, kann man dies auch so formulieren, dass für eine gegebene Wechselwirkung  $g$  eine kritische Länge  $L^*$  für die Unordnungsregion existiert, oberhalb derer der Kondensatfluss zeitabhängig wird.

Das Hauptergebnis dieses Kapitels besteht in der Feststellung, dass schon eine moderate Nichtlinearität zu einer dramatischen Änderung der Transmissionseigenschaften des Systems führt. Insbesondere scheint die übliche Beschreibung der Transmissionseigenschaften im Rahmen der Anderson-Lokalisierungstheorie nicht mehr adäquat zu sein, da die zeitliche Dynamik eine dominante Eigenschaft des Systems wird.

### 5.3.3 Lokalisierung im wechselwirkenden System?

Um weitere Einsichten in die Eigenschaften der hier betrachteten Systeme zu erhalten, untersuchen wir nun den Grenzfall sehr schwacher Nichtlinearitäten. Dazu wiederholen wir die (numerischen) Rechnung des letzten Abschnittes, betrachten also das gleiche Ensemble von Unordnungsrealisierungen, nehmen nun aber einen sehr kleinen Wechselwirkungsparameter  $g$  an, der dem Energieverhältnis  $E_{int}/E_{kin} = 1/100$  entspricht. Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abb.5.20 gezeigt. Im Einklang mit den qualitativen Aussagen am Ende des vorherigen Abschnitts stellen wir fest, dass der Übergang von zeitunabhängigem zu zeitabhängigem Verhalten zu größeren Längen  $L$  der Unordnungsregionen verschoben wird ( $L^* \approx 600\mu$  m). Die Tatsache, dass der Übergang nun erst bei großen Längen stattfindet, erlaubt es uns nun, separat für die zeitunabhängigen und zeitabhängigen Daten das Verhalten von  $\langle T \rangle_g$  zu untersuchen, und, durch Anfitten an ein exponentielles oder algebraisches Skalengesetz, qualitative Aussagen über die Abnahme der Transmission zu machen. (Dies ist bei dem Datensatz mit moderater





**Abbildung 5.20:** Übergang von zeitunabhängigem zu zeitabhängigem Verhalten im Regime einer sehr schwachen Nichtlinearität ( $E_{int}/E_{kin} = 1/100$ ). Die Stufenfunktion im oberen Teil zeigt die geometrisch gemittelte Transmission von zeitabhängigen und zeitunabhängigen Datenpunkten (Farbcodierung wie in Abb.5.18). Die beiden Unteren Teilabbildungen zeigen die separaten Mittelungen über die zeitunabhängigen Transmissionen (links) und die zeitabhängigen Transmissionen (rechts). Zusätzlich ist jeweils der beste Fit der Datenpunkte an ein exponentielles (rote gestrichelte Linie) und ein algebraisches Skalengesetz (rote durchgezogene Linie) eingezeichnet. Es wird klar erkennbar, dass die zeitunabhängigen Transmissionen exponentiell abnehmen (mit Lokalisierungslänge  $L_{loc} = 439\mu\text{m}$ ), während die zeitabhängigen einem algebraischen Verlauf folgen.

Nichtlinearität aus Abb.5.18 nicht möglich, da dort  $L^*$  so klein ist, dass eine Unterscheidung der Skalengesetze durch ein Fittingverfahren nicht aussagekräftig ist; dies liegt daran, dass die Taylorentwicklung der Funktionen  $\exp(-L/L_{loc})$  und  $L_0/(L + L_0)$  sich erst ab der zweiten Ordnung in  $L$  zu unterscheiden beginnen).

Wir stellen fest (vgl. Abb.5.20), dass die zeitunabhängigen Transmissionsdaten einem exponentiellen Skalengesetz gehorchen, während die zeitabhängigen Transmissionsdaten dem algebraischen Verlauf folgen. Aus dieser Beobachtung schließen wir, dass das algebraische Verhalten untrennbar mit dem Auftreten der zeitabhängigen Dynamik verknüpft ist. Wir folgern daraus, dass das System, solange auch in Anwesenheit einer Wechselwirkung noch stationäre Streuzustände besetzt werden, dem gewöhnlichen Lokalisierungsszenario folgt, wobei die Lokalisierungslänge gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall kleiner wird. Dieses Szenario scheint zusammenzuberechnen, sobald der Transportprozess intrinsisch zeitabhängig wird.

Die Beobachtung, dass die gemittelte Transmission einem algebraischen Verlauf folgt, führen wir auf die Definition der zeitgemittelten Transmissionen  $\bar{T}_\alpha$  zurück (vgl (4.97)), denn bei dieser Mittelungsprozedur gehen die Phaseninformationen, welche zunächst beim Lösen der Gross-Pitaevskii-Gleichung vollständig berücksichtigt werden, verloren. Damit bleiben alle gegebenenfalls auftretenden Interferenzeffekte unberücksichtigt.

Wir können also abschließend festhalten, dass unsere Rechnungen darauf hindeuten, dass auch für repulsiv wechselwirkende Atome das Phänomen der Andersonlokalisierung noch auftritt, solange stationäre Zustände besetzt werden. Wir gehen davon aus, dass diese Aussage auch auf Systeme zutrifft, deren kritische Länge  $L^*$  so klein ist, dass der exponentielle Abfall nicht durch ein Anfitten der Transmissionsdaten explizit nachgewiesen werden kann. Erst das Eintreten explizit zeitabhängiger Transportprozesse macht diese Beschreibung obsolet.

# Kapitel 6

## Numerische Methoden

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der numerischen Integration der zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + U|\psi(x,t)|^2 \right] \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t). \quad (6.1)$$

Wir bezeichnen den Wechselwirkungsparameter hier nicht wie bisher mit  $g$ , sondern mit dem Symbol  $U$ , um anzudeuten, dass der Parameter nicht von der bisher häufig benutzten Form  $2\hbar\omega_{\perp}a_s$  sein muss. Wir führen zunächst ein implizites Integrationsverfahren ein, das auf einer numerischen Auswertung des Zeitentwicklungsoperators beruht. Dieses wird dann auf eine Darstellung der Wellenfunktion in einer Gitterbasis angewendet. Zudem geben wir einen kurzen Abriss der Imaginärzeitpropagationsmethode, die es erlaubt, Grundzustandswellenfunktionen von Bose-Einstein Kondensaten numerisch zu berechnen. Zudem zeigen wir, wie höherdimensionale Systeme mit der Split-Operator Methode numerisch integriert werden können. Des Weiteren konzipieren wir absorbierende Randbedingungen, die es erlauben, Transport in offenen Quantensystemen zu simulieren und zeigen, wie der Quellterm aus Abschnitt 4.3 numerisch implementiert wird. Im Folgenden setzen wir zur Vereinfachung  $\hbar = m = 1$ .

### 6.1 Implizites Integrationsschema

Wir betrachten in diesem Kapitel eine eindimensionale, nichtlineare Schrödingergleichung und geben ein implizites Verfahren an, um diese partielle Differentialgleichung zu lösen. Wir benutzen dazu die quantenmechanische Zeitentwicklung

und definieren zunächst einen effektiven Hamiltonoperator  $H(t)$ :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= H(t) \psi(x, t) \\ \text{mit} \\ H(t) &\equiv -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + U|\psi(x, t)|^2. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Hierbei kann der nichtlineare Wechselwirkungsterm  $U|\psi(x, t)|^2$  als zusätzliches, zeitabhängiges, effektives Potential angesehen werden. Die Zeitentwicklung der nichtlinearen Schrödingergleichung (6.2) ist dann durch

$$\psi(x, t) = \mathcal{U}(t, t_0) \psi(x, t_0) \quad (6.3)$$

gegeben. Die Zeitentwicklung der nichtlinearen Schrödingergleichung ist formal durch den selbstkonsistenten Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, t_0) &= \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_{t_0}^t H(t') dt' \right] = \\ \mathcal{U}(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \dots \quad (6.4) \end{aligned}$$

gegeben [121]. Hierbei fassen wir den nichtlinearen Term  $U|\psi(x, t)|^2$  als selbstkonsistentes, zeitabhängiges Effektivpotential auf. Für kleine Zeitdifferenzen  $\Delta t \equiv t - t_0$  kann (6.4) gemäß dem Mittelwertsatz der Integralrechnung folgendermaßen geschrieben werden

$$\mathcal{U}(t + \tau, t) \simeq 1 - iH(\tilde{t}) \Delta t + \frac{(-i)^2}{2} H^2(\tilde{t}) \Delta t^2 + \dots \text{ mit } \tilde{t} \in [t, t + \Delta t]. \quad (6.5)$$

Wir nehmen nun an, der Wert von  $\psi(x, t)$  zur Zeit  $t$  sei bekannt. Mittels (6.5) soll nun  $\psi(x, t + \Delta t)$  errechnet werden. Im Allgemeinen ist  $\tilde{t}$  nicht bekannt, wir setzen daher näherungsweise zur numerischen Auswertung von (6.5)  $\tilde{t} = t$ . Ein einfaches explizites Lösungsverfahren ergibt sich aus (6.5), wenn nur die Terme bis einschließlich Ordnung  $\mathcal{O}((\Delta t)^1)$  Berücksichtigung finden. Damit findet man

$$\psi(x, t + \Delta t) = [1 - iH(t)\Delta t] \psi(x, t). \quad (6.6)$$

Dieses explizite Integrationsverfahren ist aber zum einem numerisch instabil [122], zum anderen erhält es die Norm der Wellenfunktion nicht, da der Operator  $[1 - iH(x, t)\Delta t]$  nicht unitär ist. Um diese beiden Nachteile zu umgehen, verwenden wir folgende, unter dem Namen *Caley's Form* bekannte, Darstellung des Zeitentwicklungsoperators [123, 124]

$$\mathcal{U}_C(t + \tau, t) \equiv \frac{1}{1 + \frac{i}{2}H(t)\Delta t} \left[ 1 - \frac{i}{2}H(t)\Delta t \right]. \quad (6.7)$$

Entwickelt man den Operator  $\mathcal{U}_C$  bis einschließlich zur zweiten Ordnung in  $\Delta t$ , so findet man, dass er bis zur zweiten Ordnung mit (6.5) übereinstimmt. Zudem ist die Erhaltung der Norm gewährleistet, da  $\mathcal{U}_C$  unitär ist. Mittels (6.7) ergibt sich damit folgendes implizites Integrationsschema

$$\left(1 + \frac{1}{2}iH\Delta t\right) \psi(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{2}iH\Delta t\right) \psi(x, t). \quad (6.8)$$

Bei der numerischen Simulation der Zeitentwicklung über eine Zeitperiode  $\Delta T = t_f - t_i$  (mit  $t_f > t_i$ ) teilen wir  $\Delta T$  in  $N_t$  gleiche Zeitintervalle  $\Delta t = \Delta T/N_t$  auf. Ziel ist es, mittels des impliziten Schemas (6.8) die Wellenfunktion zu den diskreten Zeitpunkten  $t_n = n\Delta t$  numerisch zu berechnen.

## 6.2 Entwicklung nach einer Gitterbasis

Um die Gross-Pitaevskii Gleichung numerisch zu integrieren, entwickeln wir die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  nach einer diskreten Basis. Dazu teilen wir den Ortsbereich  $\mathcal{B} \equiv [x_{min}..x_{max}]$  in  $N_x$  gleiche Intervalle der Länge  $\Delta x \equiv (x_{min} - x_{max})/N_x$  auf und definieren als Basiszustände

$$\chi_j \equiv \begin{cases} 1 : x_j - \frac{1}{2}\Delta x \leq x < x_j + \frac{1}{2}\Delta x \\ 0 : \text{ansonsten,} \end{cases} \quad (6.9)$$

wobei der Index  $j$  von 1 bis  $N_x$  die einzelnen Gitterplätze  $x_j = x_{min} + j\Delta x$  nummeriert. Die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  nimmt mit den Entwicklungskoeffizienten  $\psi_j(t_n) \equiv \psi_j^n$  die Form

$$\psi(x, t_n) = \sum_{j=1}^N \psi_j^n \chi_j \quad (6.10)$$

an. Die in der nichtlinearen Schrödingergleichung auftretende zweite Ableitung nach  $x$  am Ort  $x = x_j$  wird durch die wohlbekannte diskretisierte Näherung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x_j, t_n) \simeq \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (6.11)$$

in einen numerischen Algorithmus implementiert. Der Term  $(1 - \frac{1}{2}iH\Delta t) \psi^n$  nimmt damit zum Zeitpunkt  $t_n$  in der diskretisierten Darstellung die Form

$$\left(1 - \frac{1}{2}iH\Delta t\right) \psi(x_j, t_n) \simeq \psi_j^n - \frac{1}{2}i\Delta t \left[ -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n + U |\psi_j^n|^2 \psi_j^n \right] \quad (6.12)$$

an. Hierbei ist  $V_j$  der Wert des externen Potentials am  $j$ -ten Gitterplatz. Unter Benutzung von

$$\begin{aligned}\alpha &\equiv i \frac{\Delta t}{4\Delta x^2} \\ \beta_j &\equiv i \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} + i \frac{1}{2}\Delta t V_j + i \frac{1}{2}\Delta t U|\psi_j^n|^2\end{aligned}\quad (6.13)$$

finden wir für den Operator  $(1 - \frac{1}{2}iH\Delta t)$  folgende Tridiagonalmatrixdarstellung

$$\mathbf{D}_1 \equiv \left[ \left( 1 - \frac{1}{2}iH\Delta t \right) \right] = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & \alpha & 1 - \beta_{j-1} & \alpha & \\ & & \alpha & 1 - \beta_j & \alpha \\ & & & \alpha & 1 - \beta_{j+1} & \alpha \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Der Operator  $(1 + \frac{1}{2}iH\Delta t)$  hat analogerweise die Matrixdarstellung

$$\mathbf{D}_2 \equiv \left[ \left( 1 + \frac{1}{2}iH\Delta t \right) \right] = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & -\alpha & 1 + \beta_{j-1} & -\alpha & \\ & & -\alpha & 1 + \beta_j & -\alpha \\ & & & -\alpha & 1 + \beta_{j+1} & -\alpha \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (6.15)$$

Die numerische Auswertung des impliziten Integrationsschemas (6.8) reduziert sich somit auf die Matrixengleichung

$$\mathbf{D}_2 \vec{\psi}^{n+1} = \mathbf{D}_1 \vec{\psi}^n \quad \Rightarrow \quad \vec{\psi}^{n+1} = \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{D}_1 \vec{\psi}^n. \quad (6.16)$$

Die Vektoren  $\vec{\psi}^n$  und  $\vec{\psi}^{n+1}$  sind definiert durch

$$\vec{\psi}^n \equiv \begin{pmatrix} \psi_1^n \\ \vdots \\ \psi_j^n \\ \vdots \\ \psi_{N_x}^n \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\psi}^{n+1} \equiv \begin{pmatrix} \psi_1^{n+1} \\ \vdots \\ \psi_j^{n+1} \\ \vdots \\ \psi_{N_x}^{n+1} \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Für die hier durchzuführende Invertierung einer tridiagonalen Matrix existieren zahlreiche effiziente numerische Algorithmen. In dieser Arbeit wurde die **NAG Fortran Library Routine F07CNF** verwendet: Diese Routine berechnet die Lösung des Systems von linearen Gleichungen der Form  $\mathbf{A}\vec{X} = \vec{B}$ . Hierbei ist  $\mathbf{A}$  eine tridiagonale  $n \times n$  Matrix,  $\vec{B}$  ein bekannter  $n$ -komponentiger Vektor;  $\vec{X}$  ist der

zu berechnende  $n$ -komponentige Vektor. Wir identifizieren  $\mathbf{A} \equiv \mathbf{D}_2$ ,  $\vec{B} \equiv \mathbf{D}_1 \vec{\psi}^n$  und  $\vec{X}$  entspricht der Wellenfunktion  $\vec{\psi}^{n+1}$ . Führt man das Schema (6.16)  $N_t$ -mal hintereinander aus, erlaubt es dies, ausgehend von der Wellenfunktion zur Zeit  $t_i$ , diejenige zum Zeitpunkt  $t_f$  numerisch zu berechnen.

### 6.3 *Predictor-Corrector* Methode

Aufgrund der Nichtlinearität  $U|\psi|^2$  ist der effektive Hamiltonoperator (6.2) zeitabhängig. Berechnet man nun, ausgehend von  $\psi(x, t)$ , mittels der Matrixdarstellung (6.16) des Integrationsschemas den Wert von  $\psi(x, t + \Delta t)$ , so geht in die Matrizen  $\mathbf{D}_1 = [1 - iH(x, t)\Delta t/2]$  und  $\mathbf{D}_2 = [1 + iH(x, t)\Delta t/2]$  der Wert der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  zur Zeit  $t$  ein. Dies beinhaltet aber die Näherungsannahme, dass sich während des Zeitintervalls  $\Delta t$  das durch die Nichtlinearität induzierte effektive Potential  $U|\psi|^2$  nicht ändert. Im Prinzip wird der durch diese Näherung verursachte Fehler reduziert, wenn das für die numerische Integration verwendete Zeitintervall  $\Delta t$  infinitesimal klein gewählt wird. Dies führt aber aufgrund der dadurch notwendig werdenden größeren Zahl an Matrixinversionen zu einem starken Anwachsen des numerischen Aufwandes.

Um dieses Problem zu umgehen, verwenden wir in dieser Arbeit ein zweistufiges *Predictor-Corrector* Verfahren [122, 125], das es erlaubt, den durch die Nichtlinearität induzierten Näherungsfehler zu reduzieren, ohne dabei infinitesimal kleine Zeitintervalle  $\Delta t$  verwenden zu müssen: Die grundlegende Idee besteht darin, anstelle der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  einen über das Zeitintervall  $\Delta t$  gemittelten Wert für die Wellenfunktion  $\psi$  zu verwenden. Dazu wird der Integrationsschritt, um von der Zeit  $t$  zur Zeit  $t + \Delta t$  zu gelangen, in zwei Teilschritte zerlegt. In einem ersten Schritt berechnen wir mittels (6.16) näherungsweise einen Wert  $\tilde{\psi}(x, t + \Delta t)$ , indem wir im effektiven Hamiltonoperator (6.2) für den nichtlinearen Term  $U|\psi(x, t)|^2$  setzen. Dies ist der so genannte *Predictor*-Schritt. In einem zweiten Schritt wiederholen wir den Integrationsschritt (6.16), setzten nun aber den gemittelten Wert  $U|\frac{1}{2}[\psi(x, t) + \tilde{\psi}(x, t + \Delta t)]^2$  in den nichtlinearen Term ein. Damit verwenden wir bei der Berechnung von  $\psi(x, t + \Delta t)$  in diesem so genannten *Corrector*-Schritt einen bereits besser genäherten Ausgangswert für den nichtlinearen Term. Dieses Verfahren lässt sich schematisch wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}
 &\text{Predictor Schritt :} \\
 &\psi(x, t) \xrightarrow{U|\psi(x, t)|^2} \tilde{\psi}(x, t + \Delta t) \\
 &\text{Corrector Schritt :} \\
 &\psi(x, t) \xrightarrow{U|\frac{1}{2}(\psi(x, t) + \tilde{\psi}(x, t + \Delta t))|^2} \psi(x, t + \Delta t)
 \end{aligned} \tag{6.18}$$

Im Prinzip kann ein *Predictor-Corrector* Verfahren auch mehr als lediglich einen

*Predictor* Schritt beinhalten. In numerischen Tests hat sich jedoch das hier eingeführte zweistufige Verfahren für eine quadratische Nichtlinearität als ausreichend erwiesen.

## 6.4 Numerische Genauigkeit

Prinzipiell treten bei der numerischen Umsetzung des oben eingeführten Integrationsschemas folgende vier Fehlerquellen auf:

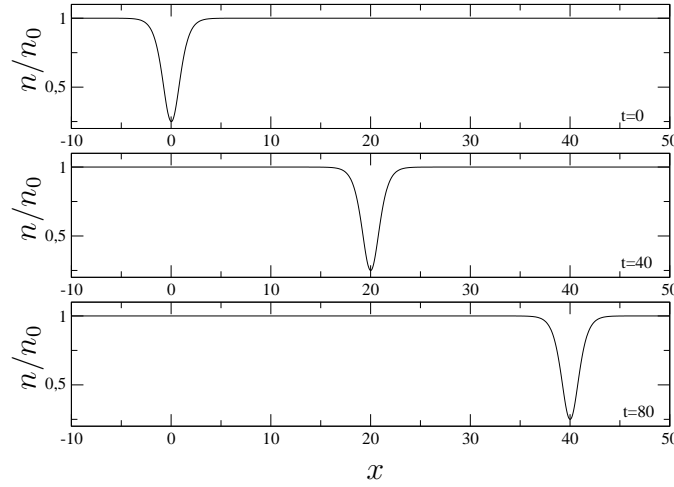
Die erste ist durch die Diskretisierung des Ortes  $x$  in der Gross-Pitaevskii-Gleichung gegeben, da die Diskretisierungsvorschrift für die zweite Ableitung nach dem Ort (6.11) eine Approximation darstellt, die mit zunehmenden Werten von  $\Delta x$  schlechter wird. Des Weiteren ist das implizite Integrationsschema (6.7) nur bis zur zweiten Ordnung in  $\Delta t$  exakt. Eine dritte Fehlerquelle besteht darin, dass sich das durch die Nichtlinearität induzierte effektive Potential  $U|\psi(x, t)|^2$  während eines Zeitpropagationsschritt ändert (vgl. Kap. 6.3). Im Prinzip lässt sich der durch diese Quellen erzeugte numerische Fehler durch die Wahl genügend kleiner Werte für  $\Delta x$  und  $\Delta t$  reduzieren. Dabei nimmt man aber zum einen in Kauf, dass sich der numerische Aufwand durch die somit gestiegene Anzahl an Gitterpunkten und notwendigen Zeitpropagationsschritten erheblich vergrößert. Zum anderen ist zu beachten, dass bei zu kleinen Intervallen  $\Delta t$  und  $\Delta x$  der numerischen Fehler zunimmt, da einem Computer nur eine endliche Speicherkapazität für den Wert einer reellen Zahl zur Verfügung steht (z.B. 16 Ziffern). Diese Feststellungen motivieren es, geeignete Methoden zur Überprüfung der erzielten numerischen Genauigkeit zu verwenden; somit wird es auch möglich, geeignete Werte für das Zeitintervall  $\Delta t$  und das Gitterintervall  $\Delta x$  zu finden, die den numerischen Fehler unter einem bestimmten Grenzwert halten und Rechnungen mit einer gewünschten Präzision bei zugleich minimalem numerischen Aufwand erlauben.

In diesem Kapitel gehen wir kurz auf zwei Methoden ein, mit deren Hilfe die numerische Genauigkeit des oben eingeführten Realzeitpropagationsalgorithmus überprüft werden kann. Dies kann zum einen mittels Vergleich der numerisch errechneten Daten mit einer analytisch bekannten Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung geschehen. Im Falle einer repulsiven Atom-Atom Wechselwirkung ( $U > 0$ ) ist das *dunkle Soliton*

$$\begin{aligned} \psi(x - vt) &= \sqrt{n_0} \left( i \frac{v}{c} + \sqrt{1 - \frac{v}{c}} \tanh \left[ \frac{x - vt}{\sqrt{2} \xi} \sqrt{1 - \frac{v}{c}} \right] \right) \\ \text{mit} \quad \xi &= \frac{1}{\sqrt{2Un_0}}, \quad c = \frac{v}{\sqrt{2v\xi}} \end{aligned} \quad (6.19)$$

eine der wenigen analytisch bekannten Lösungen dieser nichtlinearen Wellengleichung [3]. Hierbei ist  $n_0$  die Gleichgewichtsdichte des Kondensats im Limes





**Abbildung 6.1:** Propagation eines dunklen Solitons. Die drei Bilder zeigen Momentaufnahmen des Solitons zu verschiedenen Zeitpunkten; das Minimum der Dichte bewegt sich mit der konstanten Geschwindigkeit  $v$  durch die Gleichgewichtsdichte  $n_0$ .

$x \rightarrow \pm\infty$  und  $v$  die Geschwindigkeit des Solitons ( $0 < v < c$ ). Diese Solitonlösung ist durch ein Dichteminimum charakterisiert, das mit einer gegebenen Geschwindigkeit  $v$  durch ein Kondensat der Gleichgewichtsdichte  $n_0$  propagiert (vgl. 6.1). Der Ort des Minimums  $x_m$  ist somit durch  $x_m = vt$  gegeben. Numerische Fehler zeigen sich in einer Abweichung der numerisch errechneten Geschwindigkeit  $v_{\text{num}}$  vom theoretisch zu erwartenden konstanten Wert  $v$ . Als Maß für den Fehler  $\mathcal{F}$  zum Zeitpunkt  $t$  verwenden wir den Betrag der Abweichung

$$\mathcal{F} \equiv |v - v_{\text{num}}|. \quad (6.20)$$

Damit kann der Fehler bei gegebenen Werten von  $\Delta t$  und  $\Delta x$  abgeschätzt werden, bzw. die Intervalle so gewählt werden, dass  $\mathcal{F}$  unterhalb eines vorgegebenen Grenzwerts bleibt.

Eine weitere Methode zur Abschätzung des numerischen Fehlers besteht darin, die numerisch errechneten Lösungen in die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung einzusetzen und somit die Abweichung  $\delta(x, t)$  zu bestimmen. Wir betrachten also

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + U|\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) + \delta(x, t), \quad (6.21)$$

wobei die Abweichung  $\delta(x, t)$  im Idealfall für alle Orte  $x$  und alle Zeiten  $t$  möglichst nahe bei 0 liegen soll. Numerisch werten wir (6.22) gemäß dem wohlbekannten

Schema

$$\begin{aligned} \delta(x, t) = & \frac{1}{2} \frac{\psi(x + \Delta x, t) - 2\psi(x, t) + \psi(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} - \\ & -i \frac{\psi(x, t + \Delta t) - \psi(x, t - \Delta t)}{2\Delta t} - \\ & - (V(x) + U|\psi(x, t)|^2) \psi(x, t) \end{aligned} \quad (6.22)$$

aus. Die Zeitableitung wird hier *symmetrisch* bezüglich des Zeitpunktes  $t$  berechnet. Um hier den numerischen Fehler  $\mathcal{F}$  zur Zeit  $t$  zu quantifizieren, berechnen wir die Maximumsnorm des Abweichungsterms  $\delta(x, t)$

$$\mathcal{F} \equiv \max(|\delta(x, t)|), \quad x_{\min} \leq x \leq x_{\max}. \quad (6.23)$$

Mittels dieser Methode können wir überprüfen, ob der Fehler  $\mathcal{F}$  während der numerischen Integration bei gegebenen Werten für  $\Delta t$  und  $\Delta x$  unterhalb eines Grenzwertes bleibt und somit eine gewünschte Präzision erreicht wird.

Für alle in dieser Arbeit präsentierten numerischen Ergebnisse gilt  $\mathcal{F} < 1\%$ ; lediglich bei der numerischen Untersuchung der Unordnungsregionen haben wir eine Fehlertoleranz von  $2 - 3\%$  geduldet, um den numerischen Aufwand in einem vernünftigen Rahmen zu halten.

## 6.5 Imaginärzeitpropagation

Die bisher in diesem Kapitel entwickelte numerische Apparatur kann nicht nur zur Simulation der Zeitentwicklung eines Bose-Einstein Kondensates verwendet werden, sondern ermöglicht es auch, die Grundzustandswellenfunktion  $\phi_o(x)$  eines Kondensates in einem externen Potential zu berechnen. Unter dem Grundzustand verstehen wir den energetisch niedrigsten Zustand, der eine Lösung der Schrödingergleichung bzw. Gross-Pitaevskii-Gleichung darstellt. Die hier vorzustellende Methode ist unter dem Namen Imaginärzeitpropagation bekannt [126, 127] und erlaubt die Berechnung von  $\phi_o(x)$  mit vorgegebener Norm

$$\mathcal{N} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_o(x)|^2 dx. \quad (6.24)$$

Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist die quantenmechanische Zeitentwicklung (6.3) der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$ . Für infinitesimal kleine Zeitintervalle  $\Delta t$  wird (6.3) zu

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = e^{-iH(x, t)\Delta t} \psi(x, t_0) \quad (6.25)$$

Wir ersetzen nun

$$t \longrightarrow \tau \equiv -it \quad \Rightarrow \quad \Delta t \longrightarrow \Delta\tau \equiv -i\Delta t. \quad (6.26)$$

Durch diese Substitution erhält man aus der Schrödingergleichung die Diffusionsgleichung

$$-\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t), \quad (6.27)$$

welche unter der Nebenbedingung (6.24) zu lösen ist (die Gross-Pitaevskii-Gleichung wird zu einer *nichtlinearen Diffusionsgleichung*). Die Zeitentwicklung von (6.27) für ein infinitesimal kleines Zeitintervall  $\Delta t$  ist durch

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = e^{-H(x, t)\Delta t} \psi(x, t_0) \quad (6.28)$$

gegeben.

Wir betrachten zunächst den linearen Fall ( $U = 0$ ). Hier können wir eine auf  $\mathcal{N}$  normierte Wellenfunktion  $\psi$  nach einer Orthonormalbasis  $\mathcal{B} \equiv \{\phi_i\}$  entwickeln

$$\begin{aligned} \psi(x, t_0) &= c_0 \phi_0(x) + \sum_{i>0} c_i \phi_i(x), \\ \text{mit } \mathcal{N} &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t_0)|^2 dx = \sum_i |c_i|^2 \end{aligned} \quad (6.29)$$

wobei  $\phi_0$  der gesuchte Grundzustand sei. Wenden wir nun  $\exp(-H\Delta t)$  auf (6.29) an, so erhalten wir

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = c_0 e^{-E_0 \Delta t} \phi_0(x) + \sum_{i>0} c_i e^{-E_i \Delta t} \phi_i(x), \quad (6.30)$$

wobei  $E_i$  die Eigenenergien der Basiszustände  $\phi_i$  sind (es gelte folgende aufsteigende Ordnung:  $0 \leq E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$ ). Daraus ergibt sich für die Exponentialfaktoren in (6.30) die Größenrelation  $1 \geq e^{-E_0 \Delta t} \geq e^{-E_1 \Delta t} \geq e^{-E_2 \Delta t} \geq \dots 0$  und die höheren Moden  $\phi_i$  ( $i \geq 1$ ) sind im Vergleich zur Grundmode  $\phi_0$  um den Faktor  $\exp[(E_0 - E_i)\Delta t]$  exponentiell gedämpft. Zudem gilt

$$\tilde{\mathcal{N}} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t_0 + \Delta t)|^2 dx \leq \mathcal{N}, \quad (6.31)$$

da die Exponentialfaktoren in (6.30) die Norm von  $\psi(x, t_0 + \Delta t)$  erniedrigen. Es wurde aber als Nebenbedingung vorgegeben, dass die Norm der Wellenfunktion erhalten bleiben soll. Wir multiplizieren daher  $\psi(x, t_0 + \Delta t)$  mit dem Faktor  $\sqrt{\mathcal{N}/\tilde{\mathcal{N}}}$  und erhalten damit wieder eine auf  $\mathcal{N}$  normierte Wellenfunktion mit einer im Vergleich zu  $\psi(x, t_0)$  stärker gewichteten Grundzustandskomponente  $\phi_0$ . Durch  $N_t$ -malige Iteration der Vorschrift (6.28) (wobei nach jedem Iterationsschritt die Wellenfunktion wieder auf  $\mathcal{N}$  renormiert wird) werden die höheren

Moden systematisch exponentiell ausgedämpft; auf diese Weise kann aus einem beliebig gewählten Anfangszustand  $\psi(x, t_0)$ , der lediglich der Bedingung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t_0) \phi_0(x) dx \neq 0 \quad (6.32)$$

genügen muss, der gesuchte Grundzustand  $\phi_0$  extrahiert werden.

Die für die lineare Schrödingergleichung verwendete Argumentationsführung basiert auf der Entwicklung der Wellenfunktion nach einer Orthonormalbasis  $\mathcal{B}$ . Dies ist aber im Falle der nichtlinearen Gross-Pitaevskii-Gleichung nicht mehr möglich, da dann das Superpositionsprinzip ungültig wird. Dennoch lässt sich auch in diesem Fall mittels oben beschriebener Prozedur der Grundzustand finden; wir skizzieren kurz die zugrundeliegende Idee: Um den energetischen Grundzustand eines Bose-Einstein-Kondensates mit  $\mathcal{N}$  Bosonen zu finden, können wir das Energiefunktional

$$E[\psi] = \int \left( \frac{1}{2} \left| \frac{\partial}{\partial x} \psi \right|^2 + V(x) |\psi|^2 + \frac{U}{2} |\psi|^4 \right) dx \quad (6.33)$$

unter Berücksichtigung der Nebenbedingung (6.24) minimieren. Dazu verwenden wir ein Gradientenverfahren mit dem wir, ausgehend von einem Startwert  $E[\psi(x, t_0)]$ , das Minimum des Funktionalen (6.33) iterativ bestimmen. Der Gradient ist durch die Funktionalableitung  $\delta E / \delta \psi^*$  gegeben. Da dieser Gradient immer in die Richtung des stärksten Anstiegs des Funktionalen zeigt, nähern wir uns dem Minimum, wenn wir der Richtung des negativen Gradienten folgen

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = \psi(x, t_0) - \Delta t \frac{\delta E}{\delta \psi^*}. \quad (6.34)$$

Es gilt dann  $E[\psi(x, t_0 + \Delta t)] \leq E[\psi(x, t_0)]$ . Schreiben wir (6.34) in der Form

$$\frac{\psi(x, t_0 + \Delta t) - \psi(x, t_0)}{\Delta t} = - \frac{\delta E}{\delta \psi^*}, \quad (6.35)$$

so finden wir im Grenzfall infinitesimal kleiner Zeitintervalle  $\Delta t$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\delta E}{\delta \psi^*}. \quad (6.36)$$

Werten wir den Gradienten mittels (6.33) aus, so finden wir, dass nun die *nicht-lineare Diffusionsgleichung*

$$-\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + U |\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) \quad (6.37)$$

mit der Nebenbedingung (6.24) zu lösen ist, um den energetischen Grundzustand zu erhalten.

Die numerische Implementierung dieses Problems erfolgt wieder unter Verwendung des impliziten Integrationsschemas von Abschnitt (6.1). Gleichung (6.8) lautet in einer für die Imaginärzeitpropagation modifizierten Version

$$\left(1 + \frac{1}{2}H\Delta t\right) \psi(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{2}H\Delta t\right) \psi(x, t). \quad (6.38)$$

Entwickeln wir nun wieder die Wellenfunktion nach der Gitterbasis (6.9), so finden wir als Matrixdarstellung von (6.38)

$$\vec{\psi}^{n+1} = \tilde{\mathbf{D}}_2^{-1} \tilde{\mathbf{D}}_1 \vec{\psi}^n \quad (6.39)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{D}}_1 \equiv \left[ \left(1 - \frac{1}{2}H\Delta t\right) \right] = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \alpha & i - \beta_{j-1} & \alpha & & \\ & & \alpha & i - \beta_j & \alpha & \\ & & & \alpha & i - \beta_{j+1} & \alpha \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix} \quad (6.40)$$

und

$$\tilde{\mathbf{D}}_2 \equiv \left[ \left(1 + \frac{1}{2}H\Delta t\right) \right] = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & -\alpha & i + \beta_{j-1} & -\alpha & & \\ & & -\alpha & i + \beta_j & -\alpha & \\ & & & -\alpha & i + \beta_{j+1} & -\alpha \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (6.41)$$

Um nun mit der Imaginärzeitpropagation den Grundzustand zu bestimmen, wenden wir das Iterationsschema

$$\begin{aligned} \text{Propagationschritt: } \vec{\psi}^{n+1} &= \tilde{\mathbf{D}}_2^{-1} \tilde{\mathbf{D}}_1 \vec{\psi}^n \\ \text{Renormierung: } \vec{\psi}^{n+1} &\rightarrow \vec{\psi}^{n+1} = \sqrt{\mathcal{N}/\tilde{\mathcal{N}}} \vec{\psi}^{n+1} \end{aligned} \quad (6.42)$$

solange iterativ an, bis sich eine gegebene Startwellenfunktion  $\vec{\psi}^{n=0}$  zu einer stationären Wellenfunktion entwickelt hat. Numerisch lässt sich dies implementieren, indem wir nach jedem Integrationschritt die *Maximumsnorm*

$$\mathcal{N}_{\max} = \max |\psi_i^{n+1} - \psi_i^n|, \quad i = 1 \dots N_x \quad (6.43)$$

berechnen. Sobald  $\mathcal{N}_{\max}$  über mehrere Propagationsschritte kleiner als ein vorgegebener Grenzwert  $\delta$  wird, so sprechen wir davon, dass der stationäre Grundzustand im Rahmen einer gewünschten Präzision erreicht worden ist. In unseren

Rechnungen wurde  $\delta = 10^{-12}$  gewählt. Durch Einsetzen der erhaltenen Wellenfunktion in die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung kann gezeigt werden, dass es sich tatsächlich um einen Eigenzustand handelt. Damit ist aber nicht bewiesen, dass es sich tatsächlich um den energetischen Grundzustand handelt, weil das Energiefunktional (6.33) neben dem gesuchten globalen Minimum (das dem Grundzustand entspricht) im Prinzip weitere lokale Minima aufweisen kann. Dieser Tatsache kann dadurch Rechnung getragen werden, indem wir eine Startwellenfunktion  $\psi(x, t_0)$  wählen, die im Konfigurationsraum der Wellenfunktionen bereits qualitative Übereinstimmung mit dem zu erwartendem Grundzustand aufweist. Konkret bedeutet dies, dass wir im Falle einer schwachen oder, moderaten Atom-Atom Wechselwirkung für  $\psi(x, t_0)$  den bekannten Grundzustand des wechselwirkungsfreien Systems setzen. Im Grenzfall starker Wechselwirkung bietet es sich an, als Startwellenfunktion die *Thomas-Fermi* Wellenfunktion [3] zu verwenden. Damit ist weitgehend sichergestellt, numerisch einen Grundzustand zu finden, der sich stetig in einen der genannten Grenzfälle überführen lässt.

## 6.6 Zylindersymmetrische Probleme

Häufig werden Fallengeometrien betrachtet, die gewisse Symmetrien aufweisen. Im Fall von magnetischen Wellenleitern nimmt die Zylindersymmetrie eine prominente Stellung ein. Insbesondere sind dabei Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung von Interesse, die bezüglich der Zylindersymmetrieachse rotationsinvariant sind. Das zu betrachtende System wird durch die Radialvariable  $r$  und die Longitudinalvariable  $x$  beschrieben. Wir wollen uns hier auf den einfachen Fall von Translationsinvarianz entlang der  $x$ -Richtung beschränken; das Fallenpotential  $V(r)$  ist bezüglich der longitudinalen  $x$ -Achse radialsymmetrisch. Das im Prinzip dreidimensionale System kann somit durch die eindimensionale, nichtlineare Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + U|\psi|^2 \right] \psi, \quad r > 0 \quad (6.44)$$

beschrieben werden. In diesem Kapitel wollen wir angeben, wie die entsprechenden Matrizen für das implizite Integrationsschema (6.8) für diesen Fall lauten. Der effektive Hamiltonoperator hat nun die Form

$$H_{zyl} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + U|\psi|^2; \quad (6.45)$$

$H$  ist lediglich vom Radius  $r \geq 0$  abhängig. Wenden wir die Operatoren  $(1 \pm \frac{i}{2} H_{zyl} \Delta t)$  auf die Wellenfunktion  $\psi$  in der Gitterbasisdarstellung (6.9) an, so

finden wir für  $r > 0$

$$\begin{aligned} \left(1 \pm \frac{i}{2} H_{zyl} \Delta t\right) \psi(r, t) &= \psi_j^n \pm \frac{i}{2} \Delta t \left( -a \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta r^2} - \frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - \psi_{j-1}^n}{2\Delta r r_j} \right) \pm \\ &\quad \pm \frac{i}{2} \Delta t (V_j \psi_j^n + U |\psi_j^n|^2 \psi_j^n) \quad \text{für } j > 0. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Die diskreten Gitterpunkte sind gegeben durch  $r_j = 0 + j\Delta r$  ( $j = 0..N_r$ ). Der Spezialfall  $r = 0$  muss gesondert betrachtet werden: Dazu ist es notwendig eine zusätzliche Bedingung vorzugeben, die die Symmetrie der Wellenfunktion betrifft. Da die Wellenfunktion überall stetig und stetig differenzierbar sein soll und, ihre Drehimpulsquantenzahl  $m_l = 0$  sei (keine Rotation um die longitudinale Achse des Wellenleiters), muß die Bedingung

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} \psi \right|_{r=0} = 0 \quad (6.47)$$

gelten. Mit der Regel von L'Hospital [128] folgt aus (6.47)

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi \Big|_{r=0} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi \Big|_{r=0}. \quad (6.48)$$

Damit finden wir für  $r = 0$  (d.h. am Gitterpunkt  $j = 0$ ) folgende diskretisierte Darstellung:

$$\begin{aligned} \left(1 \pm i \frac{1}{2} H_{zyl} \Delta t\right) \psi(0, t) &= \psi_0^n \pm \frac{i}{2} \Delta t \left( -2 \frac{1}{2} \frac{\psi_1^n - 2\psi_0^n + \psi_1^n}{\Delta r^2} \right) \pm \\ &\quad \pm \frac{i}{2} \Delta t (V_0 \psi_0^n + U |\psi_0^n|^2 \psi_0^n) \quad \text{für } j = 0. \end{aligned} \quad (6.49)$$

Dabei wurde der in der zweiten Ableitung eigentlich vorhandene Term  $\psi_{-1}^n$  gemäß der obigen Symmetrieannahme durch  $\psi_1^n$  ersetzt. Wir führen folgende Bezeichnungen ein:

$$\begin{aligned} \alpha_j^1 &\equiv -\frac{i}{4} \Delta t \left( \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_j \Delta r} \right) \\ \alpha_j^2 &\equiv -\frac{i}{4} \Delta t \left( \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_j \Delta r} \right) \\ \beta_j &\equiv i \Delta t \left( \frac{1}{2\Delta r^2} + \frac{1}{2} V_j + \frac{1}{2} U |\psi_j^n| \right) \\ \gamma &\equiv i \Delta t \left( 1 \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2} V_0 + U |\psi_0^n| \frac{\Delta t}{2} \right) \end{aligned} \quad (6.50)$$

Damit finden wir die Matrizen

$$\mathbf{D}_1^{zyl} \equiv \left[ 1 - \frac{i}{2} H_{zyl} \Delta t \right] = \begin{pmatrix} 1 - \gamma & \frac{i\Delta t}{\Delta r^2} & & & \\ \alpha_1^2 & i - \beta_1 & \alpha_1^1 & & \\ & \alpha_2^2 & i - \beta_2 & \alpha_2^1 & \\ & & \alpha_3^2 & i - \beta_3 & \alpha_3^1 \\ & & & \ddots & \end{pmatrix} \quad (6.51)$$

und

$$\mathbf{D}_2^{zyl} \equiv \left[ 1 + \frac{i}{2} H_{zyl} \Delta t \right] = \begin{pmatrix} 1 - \gamma & -\frac{i\Delta t}{\Delta r^2} & & & \\ -\alpha_1^2 & i + \beta_1 & -\alpha_1^1 & & \\ & -\alpha_2^2 & i + \beta_2 & -\alpha_2^1 & \\ & & -\alpha_3^2 & i + \beta_3 & -\alpha_3^1 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (6.52)$$

für die numerische Realzeitpropagation. Ersetzt man in (6.51) und (6.52)  $\Delta t$  durch  $-i\Delta t$ , so erhält man die für die Imaginärzeitpropagation benötigten Matrizen. Aufgrund der hier vorgegebenen Symmetrie kann damit der Grundzustand für eine zylindersymmetrische Konfiguration berechnet werden.

## 6.7 Höherdimensionale Systeme

Bisher beschränkten wir uns auf die numerische Behandlung effektiv eindimensionaler Systeme, die mit relativ geringem numerischen Aufwand zu behandeln sind. Betrachtet man ein  $d$ -dimensionales System, so nimmt der numerische Aufwand zum Lösen der nichtlinearen Schrödingergleichung stark zu. Arbeitet man in einer diskreten Gitterdarstellung, so ist die Anzahl der Nachbargitterplätze eines Gitterpunktes durch  $2d$  gegeben. Die Standardvorgehensweise solche partielle Differentialgleichungen zu lösen, ist die Methode der *Finiten Differenzen* [129, 130], die dazu führt, dass eine Matrixgleichung der Form  $\mathbf{A}\vec{\psi} = \vec{b}$  zu lösen ist.  $\mathbf{A}$  ist dabei eine dünn besetzte Matrix mit  $2d$  Nebendiagonalen [122] (Für  $d = 1$  erhält man eine tridiagonale Matrix der Form (6.14)). Betrachten wir zum Beispiel ein dreidimensionales System mit  $N_\nu$  (mit  $\nu = x, y, z$ ) Gitterpunkten in die  $\nu$ -te Raumrichtung, so handelt es sich bei  $\mathbf{A}$  um eine  $N \times N$ -Matrix (mit  $N \equiv N_x N_y N_z$ ).

Wir wollen im Folgenden die so genannte *Operator Splitting* Methode [122, 125] einführen, die es erlaubt, ein  $d$ -dimensionales partielles Differentialgleichungsproblem durch das Lösen von  $d$  neuen Differentialgleichungen zu behandeln. Es wird sich zeigen, dass dadurch der numerischen Aufwand für höherdimensionale Systeme stark reduziert wird. Wir betrachten hierzu die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{L}\psi. \quad (6.53)$$

Hierbei ist  $t$  die Zeit und  $\mathcal{L}$  ein partieller Differentialgleichungsoperator, der von den Ortsvariablen  $\vec{x} \equiv (x_1 \dots x_d)$  abhängt. Wir nehmen nun an, dass der Operator  $\mathcal{L}$  in  $m$  Teile zerlegt werden kann,

$$\mathcal{L}\psi = \mathcal{L}_1\psi + \mathcal{L}_2\psi + \dots + \mathcal{L}_m\psi, \quad (6.54)$$



wobei für jeden der Teiloperatoren  $\mathcal{L}_\nu$  (mit  $\nu = 1..m$ ) bereits ein Integrationsschema  $\mathcal{U}_\nu$  existiere, das es erlaubt, die Variable  $\psi$  vom Zeitschritt  $n$  zum Zeitschritt  $n + 1$  zu aktualisieren, wenn auf der rechten Seite von (6.54) nur der Term  $\mathcal{L}_\nu \psi$  stehen würde. Diese Schemata schreiben wir symbolisch als

$$\psi^{n+1} = \mathcal{U}_\nu(\psi^n, \Delta t). \quad (6.55)$$

Um nun einen vollständigen Integrationschritt für  $\mathcal{L}$  durchzuführen, ist die folgende Sequenz von Einzelschritten auszuführen:

$$\begin{aligned} \psi^{n+1/m} &= \mathcal{U}_1(\psi^n, \Delta t) \\ \psi^{n+2/m} &= \mathcal{U}_2(\psi^{n+1/m}, \Delta t) \\ &\dots \\ \psi^{n+1} &= \mathcal{U}_m(\psi^{n+(m-1)/m}, \Delta t) \end{aligned} \quad (6.56)$$

Die symbolische Schreibweise  $\psi^{n+\nu/m}$  soll verdeutlichen, dass jeder der  $m$  Einzelschritte nur einen  $m$ -ten Teil zum vollständigen Integrationschritt beiträgt.

Wir illustrieren diese Methode zunächst am wichtigen Beispiel einer dreidimensionalen, vollständig separablen Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= [H_x + H_y + H_z] \psi, \\ H_{x_\nu} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2} + V(x_\nu), \quad (x_\nu = x, y, z). \end{aligned} \quad (6.57)$$

Dieses wohlbekannte Problem zerfällt in drei voneinander unabhängige eindimensionale partielle Differentialgleichungen, die separat voneinander behandelt werden können. Wenden wir auf die Schrödingergleichung (6.57) die *Operator Splitting* Methode (6.56) an, so entsprechen den eindimensionalen Schrödingeroperatoren  $H_{x_\nu}$  die Teiloperatoren  $\mathcal{L}_\nu$ . Die  $m = 3$  Einzelschritte in (6.56) liefern somit jeweils die Lösung für eine der drei Raumrichtungen.

Wir wenden uns nun dem komplexeren Fall einer dreidimensionalen nichtlinearen Gross-Pitaevskii-Gleichung zu

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x, y, z) + U|\psi|^2 \right) \psi \\ \text{mit} \quad V(x, y, z) &= V(x) + V(y) + V(z). \end{aligned} \quad (6.58)$$

Um nun wieder geeignete Teiloperatoren  $\mathcal{L}_\nu$  zu finden, müssen wir den offensichtlich nicht separierbaren Term  $U|\psi|^2$  geeignet aufteilen. Hierzu gibt es in der Regel kein *a priori* vorgegebenes Schema, sondern das *Splitting* orientiert sich an der physikalischen Natur des betrachteten Systems. Im Falle der Gleichung (6.58)

ist es sinnvoll, die Nichtlinearität gleichmäßig auf die drei Raumrichtungen zu verteilen [125]; wir verwenden also die effektiven Teiloperatoren

$$H_{x_\nu} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2} + V(x_\nu) + \frac{1}{3} U|\psi|^2, \quad (x_\nu = x, y, z) \quad (6.59)$$

die mit den Operatoren  $\mathcal{L}_\nu$  zu assoziieren sind. Der Faktor  $1/3$  sorgt für die gleichmäßige Gewichtung von  $U|\psi|^2$  in den drei Teiloperatoren. Die  $m = 3$  nötigen Einzelschritte werden mittels der aus Abschnitt 6.1 bekannten impliziten Integrationsmethode durchgeführt. Haben wir in der  $\nu$ -ten Raumrichtung  $N_\nu$  Gitterpunkte, so sind Anstelle der  $N \times N$  Matrix  $\mathbf{A}$  nun drei Tridiagonalmatrizen vom Grad  $N_x, N_y, N_z$  zu invertieren. Für große, höherdimensionale Gitter wird deswegen durch die *Operator Splitting* Methode der numerische Aufwand erheblich reduziert [131, 132]. Damit kann die Zeitentwicklung eines Kondensates in einem höherdimensionalen System simuliert werden. Indem wir wieder zu imaginären Zeiten übergehen ( $t \rightarrow \tau \equiv -it$ ) kann mit der *Operator Splitting* Methode auch der Grundzustand eines Kondensates in einer z.B. dreidimensionalen Falle numerisch berechnet werden.

Wir stellen nun die Frage, bis zu welchem Grade das von der *Operator Splitting* Methode gelieferte Ergebnis exakt ist. Wir untersuchen dies anhand der zweidimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(x, y) + U|\psi|^2 \right) \psi, \quad (6.60)$$

wobei  $V(x, y)$  nicht separabel zu sein braucht. Wir verteilen nun die nicht-separablen Terme  $V(x, y)$  und  $U|\psi|^2$  gleichgewichtet auf die beiden Raumrichtungen (vgl. Faktor  $1/2$  in (6.61)) und definieren damit die Teiloperatoren

$$H_{x_\nu} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2} + \frac{1}{2} V(x, y) + \frac{1}{2} U|\psi|^2, \quad (x_\nu = x, y), \quad (6.61)$$

die es erlauben, das Integrationsschema (6.56) wie folgt zu schreiben:

$$\psi(x, y, t + \Delta t) = \frac{1 - \frac{i}{2} H_x \Delta t}{1 + \frac{i}{2} H_x \Delta t} \times \frac{1 - \frac{i}{2} H_y \Delta t}{1 + \frac{i}{2} H_y \Delta t} \psi(x, y, t). \quad (6.62)$$

(Die Operatoren im Nenner sind jeweils wieder zuerst anzuwenden). Hier wurde die Integration in  $y$ -Richtung vor der in  $x$ -Richtung ausgeführt. Entwickeln wir dies bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ , so finden wir

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t + \Delta t) \simeq [1 - i H_x \Delta t + i H_y \Delta t - \frac{1}{2} H_x^2 \Delta t^2 - \frac{1}{2} H_y^2 \Delta t^2 - \\ - \underline{H_x H_y} \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3)] \psi(x, y, t). \end{aligned} \quad (6.63)$$

Drehen wir die Integrationsreihenfolge in (6.62) um ( $x$  vor  $y$ -Richtung), so lautet die Entwicklung bis zur zweiten Ordnung

$$\psi(x, y, t + \Delta t) \simeq [1 - iH_x\Delta t + iH_y\Delta t - \frac{1}{2}H_x^2\Delta t^2 - \frac{1}{2}H_y^2\Delta t^2 - \underline{-H_yH_x\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^3)]\psi(x, y, t) \quad (6.64)$$

und (6.64) unterscheidet sich von (6.63) nur in dem unterstrichenen Term. Die Differenz  $\delta$  dieser beiden Ausdrücke ist

$$\delta \equiv [H_x, H_y]\Delta t^2, \quad \text{mit } [H_x, H_y] \equiv H_xH_y - H_yH_x, \quad (6.65)$$

das heißt, die *Operator Splitting* Methode ist, bis einschließlich zur ersten Ordnung in der Zeit exakt. Für den Fall einer linearen Schrödingergleichung mit separablem externen Potential (vgl. (6.57)) ist das *Splitting* somit natürlich in allen Ordnungen der Zeit exakt. Für die Numerik ergibt sich daraus die Konsequenz, dass mittels eines klein gewählten Zeitintervalls  $\Delta t$ , der durch das *Splitting* induzierte Fehler quadratisch in  $\Delta t$  verringert werden kann. Welchen Wert man für eine konkrete Rechnung genau wählt, hängt vom Betrag des Kommutators  $[H_x, H_y]$ , und somit stark von der Beschaffenheit des betrachteten Systems ab. Generell lässt sich aussagen, dass bei stärkeren Nichtlinearitäten  $\Delta t$ , wegen des somit größeren Wertes des Kommutators, kleiner zu wählen ist.

Schließlich wenden wir uns nun wiederum noch dem wichtigen Spezialfall von zylindersymmetrischen Systemen zu: Da wir uns wie in Abschnitt 6.6 für bezüglich der Zylindersymmetrieachse rotationsinvariante Lösungen  $\psi = \psi(r, z)$  interessieren, lautet der effektive Hamiltonoperator

$$H_{zyl} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r, z) + U|\psi|^2. \quad (6.66)$$

Wir spalten (6.66) folgendermaßen in Teiloperatoren auf:

$$\begin{aligned} H_{zyl} &= H_r + H_z, \\ \text{mit} \\ H_r &\equiv -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2}V(r, z) + \frac{1}{2}U|\psi|^2, \\ H_z &\equiv -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}V(r, z) + \frac{1}{2}U|\psi|^2. \end{aligned} \quad (6.67)$$

Das System wird wegen der geforderten Rotationsinvarianz letztlich durch zwei Ortskoordinaten  $r$  und  $z$  beschrieben; die nichtseparablen Anteile, wie die Nichtlinearität und das externe Potential, das prinzipiell ebenfalls nicht separabel zu sein braucht, werden wieder mit gleichem Gewicht auf die beiden Teiloperatoren  $H_z$  und  $H_r$  verteilt. Die  $m = 2$  Einzelschritte werden numerisch mittels der Integrationsschemata aus Abschnitt 6.2 (für  $H_z$ ) und Abschnitt 6.6 (für  $H_r$ ) durchgeführt.

## 6.8 Numerische Berechnung von Strömen

Betrachtet man Transportprobleme, so ist es unabdingbar, Stromdichten und Stöme zu berechnen; in diesem Abschnitt geben wir kurz an, wie diese Größen numerisch berechnet werden können. Der quantenmechanische Stromdichteoperator ist gegeben durch

$$\vec{j} = \frac{1}{2i} [\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi]. \quad (6.68)$$

Es werde nun ein 3-dimensionales System in kartesischen Koordinaten betrachtet; die Komponente von  $\vec{j}$  in Raumrichtung  $x_\nu$  ist dann durch

$$j_\nu = \frac{1}{2i} [\psi^*(\nabla_\nu\psi) - (\nabla_\nu\psi^*)\psi], \quad \nu = 1 \dots 3 \quad (6.69)$$

gegeben. Die diskretisierte Darstellung der  $\nu$ -ten Stromdichtekomponente am Ort  $\vec{x}$  lautet dann

$$j_\nu(\vec{x}) = \frac{1}{2i} \left[ \psi^*(\vec{x}) \frac{\psi(\vec{x} + \vec{e}_\nu \Delta x_\nu) - \psi(\vec{x} - \vec{e}_\nu \Delta x_\nu)}{2\Delta x_\nu} - C.C. \right]; \quad (6.70)$$

$\vec{e}_\nu$  ist der Einheitsvektor in  $\nu$ -Richtung. Der gesamte Strom  $I$ , der z. B. durch eine Fläche senkrecht zur Raumrichtung  $x$  fließt (also entlang des Wellenleiters), ist durch das Integral

$$I = \int_A j(\vec{x}) dydz \quad (6.71)$$

gegeben ( $A$  ist die Fläche, über die zu integrieren ist). Zur numerischen Auswertung auf dem Gitter, muss das Integral durch die diskrete Riemannsumme approximiert werden.

Oft berechnen wir Ströme in zylindersymmetrischen Wellenleitern; darum geben wir hierfür explizit die nötigen Formeln an, wenn die Wellenfunktion auf einem  $x, r$ -Gitter diskretisiert wird: Die  $x$ -Komponente (parallel zum Wellenleiter) der Stromdichte lautet

$$j_x(r_i) = \frac{1}{2i} \left[ \psi^*(r_i, z_j) \frac{\psi(r_i, z_{j+1}) - \psi(r_i, z_{j-1})}{2\Delta x_\nu} - C.C. \right]. \quad (6.72)$$

Der Gesamtstrom entlang der  $x$ -Richtung ist dann durch

$$I = 2\pi \int j_x(r) r dr \simeq 2\pi \sum_{i=0}^{N_r} j_x(r_i) r_i \Delta r \quad (6.73)$$

gegeben.

## 6.9 Absorbierende Ränder

Betrachtet man die Lösung von Wellengleichungen auf endlichen Gittern, so wirken die Gitterränder als harte, reflektierende Wände. Solange man mit räumlich endlich ausgedehnten, hinreichend schnell gegen null abfallenden Wellenpaketen arbeitet (die Wellenpakete müssen *quadratintegrabel* sein), kann im Prinzip durch die Wahl eines genügend großen Gitters das Problem dieser artifiziellen Rückreflektion umgangen werden. Dies führt natürlich unter Umständen zu einer erheblichen Vergrößerung des numerischen Aufwandes. Oft werden aber offene, oder unendlich ausgedehnte Systeme auf einem endlichem Gitter untersucht, deren Randbedingungen nur im Unendlichen sinnvoll definiert werden können. Man steht somit vor dem Problem, das Gitter irgendwo "abschneiden" zu müssen, ohne dass dabei Rückreflektionen am Gitterrand auftreten. Zu diesem Zwecke sind verschiedene numerische Methoden entwickelt worden, die als *absorbierende Randbedingungen* [133–135] bezeichnet werden. Diese erlauben es, Wellenpakete, die das Gitter verlassen, am Rand idealerweise reflektionsfrei zu absorbieren.

Die in dieser Arbeit verwendeten absorbierenden Randbedingungen beruhen auf einer von T. Shibata für die lineare Schrödingergleichung entwickelte Methode [133]. Wir werden im Folgenden aufzeigen, wie diese für spezielle nichtlineare Transportprobleme modifiziert werden können. Wir betrachten zunächst eine eindimensionale Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_e\right)\psi(x, t), \quad (6.74)$$

wobei  $V_e$  ein im ganzen Ortsraum konstantes Potential sei. Wir untersuchen die spezielle Lösung der Schrödingergleichung

$$\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}. \quad (6.75)$$

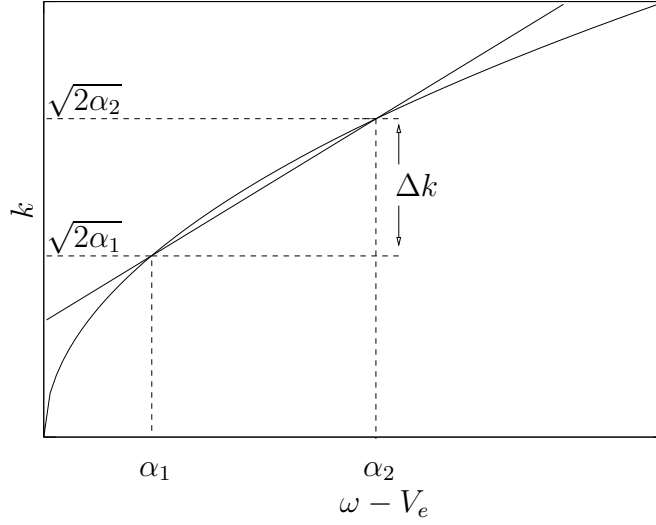
Dies ist eine ebene Welle, die der Dispersionsrelation

$$k^2 = 2(\omega - V_e) \quad (6.76)$$

genügt. Wir lösen (6.76) nach  $k$  auf und erhalten

$$k = \pm\sqrt{2(\omega - V_e)}. \quad (6.77)$$

In Gleichung (6.77) entspricht der positive Zweig einer nach rechts, der negative Zweig einer nach links laufenden ebenen Welle. Daher müssen die absorbierenden Randbedingungen für eine ebene Welle am rechtem Rand dem positiven, am linken Rand dem negativen Zweig genügen. Im Folgenden sollen spezielle partielle Differentialgleichungen für die Ränder konstruiert werden, die für ebene Wellen



**Abbildung 6.2:** Der positive Zweig der Dispersionsrelation einer ebenen Welle wird linear approximiert. Die Parameter  $\alpha_1, \alpha_2$  werden so gewählt, dass die Wellenvektoren der zu absorbierenden Wellen zwischen  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  liegen.

jeweils nur in eine Richtung durchlässig sind (diese werden oft als *one-way* Wellengleichungen bezeichnet [136]). Da die Funktion (6.77) nicht rational ist, kann aus ihr nicht in einfacher Weise eine partielle Differentialgleichung mittels der Dualrelationen

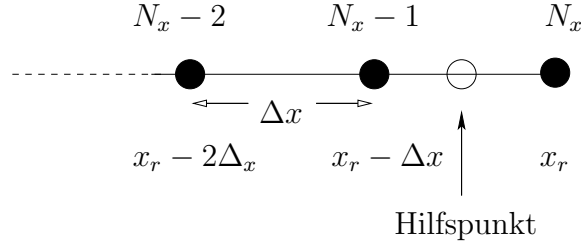
$$\frac{\partial}{\partial t} \Longleftrightarrow -i\omega, \quad \frac{\partial}{\partial x} \Longleftrightarrow ik \quad (6.78)$$

gewonnen werden. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, approximieren wir in der Umgebung des relevanten Wellenvektors  $k$  die Dispersionsrelation, wie in Abb. 6.2 für den positiven Ast gezeigt, durch die Gerade

$$k = \pm \frac{\sqrt{2\alpha_2} - \sqrt{2\alpha_1}}{\alpha_2 - \alpha_1} \omega \pm \frac{\alpha_2 \sqrt{2\alpha_1} - \alpha_1 \sqrt{2\alpha_2}}{\alpha_2 - \alpha_1}. \quad (6.79)$$

Die Parameter  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  sind so zu wählen, dass die Funktion (6.79) eine gute Approximation der Dispersionsrelation (6.77) im Impulsintervall  $\hbar \Delta k \equiv \sqrt{2\alpha_2} - \sqrt{2\alpha_1}$  darstellt. Mittels der Dualrelationen (6.78) werden aus der linearen Funktion (6.79) in eindeutiger Weise die partiellen Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \left( -i \frac{1}{g_1} \frac{\partial}{\partial x} + V_e - \frac{g_2}{g_1} \right) \psi, \\ \text{mit} \\ g_1 &\equiv \pm \frac{\sqrt{2\alpha_2} - \sqrt{2\alpha_1}}{\alpha_2 - \alpha_1}, \\ g_2 &\equiv \pm \frac{\alpha_2 \sqrt{2\alpha_1} - \alpha_1 \sqrt{2\alpha_2}}{\alpha_2 - \alpha_1} \end{aligned} \quad (6.80)$$



**Abbildung 6.3:** Schematische Darstellung des rechten Gitterrandes. Gezeigt sind drei Gitterpunkte, der Endpunkt liegt am Ort  $x_r$ .

erhalten. Werden diese Differentialgleichungen an den Rändern des Gitters geeignet implementiert, so werden dort ebene Wellen mit Impulsen  $k$ , die im Intervall  $\Delta k \equiv \sqrt{2\alpha_2} - \sqrt{2\alpha_1}$  liegen, absorbiert. Dies erlaubt es auch ganze Wellenpakete am Gitterrand zu absorbieren, wenn deren Impulsspektrum innerhalb eines Impulsintervalls  $\Delta k$  gelegen ist, für welches die Dispersionsrelation (6.77) gut durch (6.79) linear approximiert wird.

Die hier vorgestellte Methode absorbiert somit wellenvektorspezifisch: Generell gilt, die Absorptionseigenschaften der partiellen Differentialgleichungen (6.80) werden besser, wenn man zu kleineren Intervallen  $\Delta k$  übergeht. Dies bedeutet, dass die Randbedingungen (6.80) besonders zur Absorption räumlich stark ausgedehnter Wellenpakete geeignet sind, da deren Impulsspektrum im Allgemeinen klein ist (die ebene Welle kann als Grenzfall des unendlich weit ausgedehnten Wellenpakets angesehen werden mit  $\Delta k = 0$ ).

Die absorbierenden Randbedingungen lassen sich folgendermaßen in die, im Laufe dieses Kapitels entwickelte, numerische Apparatur einbauen: Wir betrachten den rechten Rand, das heißt, wir wählen in (6.80) den positiven Zweig. Das Verhalten der Wellenfunktion am Randpunkt (Index  $N$ , vgl. Abb.6.3) soll nun durch die spezielle Gleichung (6.80) bestimmt werden. Hierbei ergibt sich die Schwierigkeit, dass die Ortsableitung am Randpunkt  $x_r$  nicht numerisch zugänglich ist, da wir dazu den nicht vorhandenen Gitterpunkt  $x_r + \Delta x$  benötigen würden. Wir können aber den numerische Wert der Ortsableitung an einem *Hilfsgitterpunkt* an der Stelle  $\tilde{x} \equiv x_r - \Delta x/2$  mittels

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right|_{x=\tilde{x}} \simeq \frac{\psi(x_r, t) - \psi(x_r - \Delta x, t)}{\Delta x} \quad (6.81)$$

berechnen. Für die anderen Terme in der partiellen Differentialgleichung (6.80) ist dann natürlich der Wert der Wellenfunktion an diesem Hilfspunkt zu setzen. Diesen können wir näherungsweise durch die Mittelung der Wellenfunktionswerte an den Gitterpunkten  $x = x_r - \Delta x$  und  $x = x_r$  erhalten. Darum ist in folgender Diskretisierungsvorschrift eine Mittelung über die Wellenfunktionen am Ort  $x_r$

und  $x_r - \Delta x$  implementiert

$$\begin{aligned} & \frac{i}{2\Delta t} [\psi(x_r, t + \Delta t) + \psi(x_r - \Delta x, t + \Delta t) - \psi(x_r, t) - \psi(x_r - \Delta x, t)] = \\ & = -\frac{i}{g_1} \frac{\psi(x_r, t) - \psi(x_r - \Delta x, t)}{\Delta x} + \frac{1}{2} \left( V_e - \frac{g_2}{g_1} \right) [\psi(x_r, t) + \psi(x_r - \Delta x, t)]. \end{aligned} \quad (6.82)$$

Wie bereits erwähnt, ist die Wellenfunktion  $\psi(\tilde{x}, t)$  am Hilfspunkt  $\tilde{x}$  nicht exakt bekannt, sondern wird durch die Mittelung

$$\psi(\tilde{x}, t) \simeq \frac{1}{2} [\psi(x_r, t) + \psi(x_r - \Delta x, t)] \quad (6.83)$$

linear approximiert. Diese Näherung wird mit kleiner werdenden Intervallen  $\Delta x$  besser; darum ist bei der Anwendung der hier eingeführten absorbierenden Ränder stets zu beachten, dass artifizielle Rückreflexionen an den Rändern durch die Wahl eines möglichst kleinen Wertes für  $\Delta x$  minimiert werden.

Zur numerischen Implementierung der absorbierenden Randbedingungen schreiben wir (6.82) in der Form

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\Delta t} (\psi_N^{n+1} + \psi_{N-1}^{n+1} - \psi_N^n - \psi_{N-1}^n) &= -\frac{i}{g_1 \Delta x} (\psi_N^n - \psi_{N-1}^n) + \\ &+ \frac{1}{2} \left( V_e - \frac{g_2}{g_1} \right) (\psi_N^n + \psi_{N-1}^n), \end{aligned} \quad (6.84)$$

führen die Variablen

$$\begin{aligned} \gamma_1 &\equiv \gamma_2 \equiv \frac{i}{2\Delta t}, \\ \gamma_3 &\equiv \frac{i}{2\Delta t} + \frac{i}{g_1 \Delta x} + \left( V_e - \frac{g_2}{g_1} \right), \\ \gamma_4 &\equiv -\frac{i}{2\Delta t} - \frac{i}{g_1 \Delta x} + \left( V_e - \frac{g_2}{g_1} \right), \end{aligned} \quad (6.85)$$

ein und finden damit für den rechten Rand folgende Modifikationen der Matrizen (6.14, 6.15)

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_1 &\equiv \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & \alpha & 1 - \beta_{N-2} & \alpha & \\ & & \alpha & 1 - \beta_{N-1} & \alpha \\ & & & \gamma_3 & \gamma_4 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{D}_2 &\equiv \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & -\alpha & 1 + \beta_{N-2} & -\alpha & \\ & & -\alpha & 1 + \beta_{N-1} & -\alpha \\ & & & \gamma_1 & \gamma_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.86)$$



Um die absorbierenden Randbedingungen am linken Gitterrand zu implementieren, wählen wir in (6.80) den negativen Zweig. Eine analoge Diskretisierungsprozedur liefert für die Matrizen (6.14,6.15) am linken Rand die Modifikationen

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_1 &\equiv \begin{pmatrix} \gamma_3 & \gamma_4 & & & \\ \alpha & 1 - \beta_1 & \alpha & & \\ & \alpha & 1 - \beta_2 & \alpha & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \\ \mathbf{D}_2 &\equiv \begin{pmatrix} \gamma_1 & \gamma_2 & & & \\ -\alpha & 1 + \beta_1 & -\alpha & & \\ & -\alpha & 1 + \beta_2 & -\alpha & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.87)$$

Wir zeigen nun, wie man die, für die lineare Schrödingergleichung entwickelten absorbierenden Randbedingungen auf die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung verallgemeinern kann. Wir stellen zunächst fest, dass die ebene Welle  $\psi(x, t) = A \exp(-i\omega t \pm ikx)$  eine Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung darstellt, wenn kein externes Potential vorhanden ist. Sie erfüllt die Dispersionsrelation

$$k = \pm \sqrt{2(\omega - Un)}, \quad \text{mit } n \equiv |A|^2. \quad (6.88)$$

Der Term  $Un$  in der Dispersionsrelation (6.88) stellt ein konstantes, effektives Potential dar. Setzen wir also  $V_e = Un$ , so stellt (6.80) wieder eine geeignete absorbierende Randbedingung dar; verglichen mit dem linearem Fall muss nun zusätzlich neben dem Wellenvektor die Dichte  $n$  der zu absorbierenden Welle bekannt sein.

Wir erweitern dieses Ergebnis nun für den, im Zusammenhang mit den in dieser Arbeit betrachteten Transportproblemen, besonders wichtigen Fall einer Wellenfunktion der Form

$$\psi(x, t) = A(x, t) e^{(-i\omega t \pm iS(x, t))}. \quad (6.89)$$

Hierbei sei  $A(x, t)$  die Amplitude der Wellenfunktion und  $S(x, t)$  der Phasenfaktor. Wir betrachten nun die Ableitungen dieser Wellenfunktion nach dem Ort und der Zeit exemplarisch am rechten Rand:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) &= e^{-i(\omega t - S(x, t))} \left( \frac{\partial}{\partial x} A(x, t) + A(x, t) i \frac{\partial}{\partial x} S(x, t) \right), \\ \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -e^{-i(\omega t - S(x, t))} \left( -\frac{\partial}{\partial t} A(x, t) + A(x, t) i\omega - A(x, t) i \frac{\partial}{\partial t} S(x, t) \right). \end{aligned} \quad (6.90)$$

Entwickeln wir den Phasenfaktor  $S(x, t)$  nach  $x$  an einem Ort  $x_0$

$$\begin{aligned} S(x, t) &= S(x_0, t) + k(x_0, t)(x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \\ &\quad \mathcal{O}((x - x_0)^3) + \dots, \\ \text{mit } k(x_0, t) &\equiv \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_0}, \end{aligned} \quad (6.91)$$

so lautet die erste Gleichung von (6.90)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) &= e^{-i(\omega t - S(x, t))} \left( \frac{\partial}{\partial x} A(x, t) + A(x, t) i k(x_0, t) + \right. \\ &\quad \left. A(x, t) i \frac{\partial^2 S(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} x + \mathcal{O}((x - x_0)^2) + \dots \right) \end{aligned} \quad (6.92)$$

Aus (6.90) und (6.92) ersehen wir, dass  $\psi(x, t) = A(x, t) \exp(-i\omega t \pm iS(x, t))$  eine approximative Lösung der Differentialgleichung (6.80) darstellt, wenn die in (6.90) und (6.92) auftretenden Ableitungen der Amplitude nach dem Ort bzw. nach der Zeit nur genügend klein sind. Das heißt, es muss

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial}{\partial x} A(x, t) \right| &\ll |k A(x, t)|, \quad \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} S(x, t) \Big|_{x=x_0} \right| |x - x_0| \ll |k| \\ \text{und} \\ \left| \frac{\partial}{\partial t} A(x, t) \right| &\ll |\omega A(x, t)|, \quad \left| \frac{\partial}{\partial t} S(x, t) \right| \ll |\omega| \end{aligned} \quad (6.93)$$

gelten. In diesem adiabatischen Grenzfall nimmt (6.89) lokal um  $x_0$  die Form einer ebenen Welle an, deren lokale Amplitude  $A(x_0, t)$  und lokaler Wellenvektor  $k(x_0, t)$  auf Längen- und Zeitskalen, die wesentlich größer als  $1/k$  bzw.  $1/\omega$  sind, variieren. Wir finden somit näherungsweise zu jeder Zeit  $t$  und jedem gewünschten Ort  $x_0$  lokal eine Dispersionsrelation der Form

$$k(x_0, t) = \pm \sqrt{2(\omega - Un(x_0, t))}, \quad \text{mit } n(x_0, t) \equiv |A(x_0, t)|^2. \quad (6.94)$$

Die Orts- und Zeitabhängigkeit des lokalen Wellenvektors  $k(x_0, t)$  ist in diesem adiabatischem Grenzfall durch die Kondensatdichte  $n(x_0, t)$  gegeben. Durch eine geeignete Wahl der Parameter  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  kann die Dispersionsrelation (vgl. (6.79)) linear approximiert werden und die oben eingeführte Methode der absorbierenden Randbedingungen ist wieder anwendbar. Wählen wir für den Punkt  $x_0$  den rechten Endpunkt des Gitters  $x_r$  so trifft dort im adiabatischen Grenzfall eine Materiewelle der Form (6.89) auf, die dann absorbiert wird, wenn die Parameter  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  gemäß der zeitlichen Variation von  $k(x_r, t)$  während der Simulation geeignet adaptiert werden.

Die hier eingeführte Methode erlaubt es, die artifiziellen Rückreflexionen in unseren Simulationen auf einen Wert von unter 1 % zu bringen.

## 6.10 Numerische Implementierung des Quellterms

In diesem Abschnitt zeigen wir, wie der Materiewellen emittierende Quellterm

$$S(x, t) = S_0 \exp(-i\mu t) \delta(x) , \quad (6.95)$$

in den bisher entwickelten numerische Apparat eingebaut werden kann (im Weiteren setzen wir o.B.d.A.  $x_0 = 0$ ). Da wir mit einem Gitterbasisansatz arbeiten, bietet es sich an, die  $\delta$ -Funktion in (6.95) durch die Funktion

$$R(x) = \frac{1}{\Delta x} [\Theta(-\Delta x/2) + \Theta(+\Delta x/2)] \quad (6.96)$$

zu approximieren;  $\Theta$  ist dabei die *Heaviside*-Stufenfunktion. Um den Fehler abzuschätzen, der mit dieser Näherung einhergeht, studieren wir zunächst die stationären Lösungen der Wellengleichung

$$\mu\psi(x, t) - \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{||}(x) + U|\psi(x)|^2 \right] \psi(x) = S_0 R(x) . \quad (6.97)$$

Ist die Inhomogenität auf der rechten Seite von der Form  $S_0 \delta(x - x_0)$ , so kennen wir die Lösung der Wellengleichung bereits aus Abschnitt 4.3.1: Dort fanden wir das Ergebnis

$$\psi(x) = \frac{S_0}{ik} e^{ik|x|}, \quad \text{mit } k = \sqrt{2(\mu - Un)}. \quad (6.98)$$

Dies ist aber genau die Greensche Funktion der Differentialgleichung (6.97). Somit finden wir eine Lösung  $\tilde{\psi}(x)$  von (6.97) durch den Ansatz

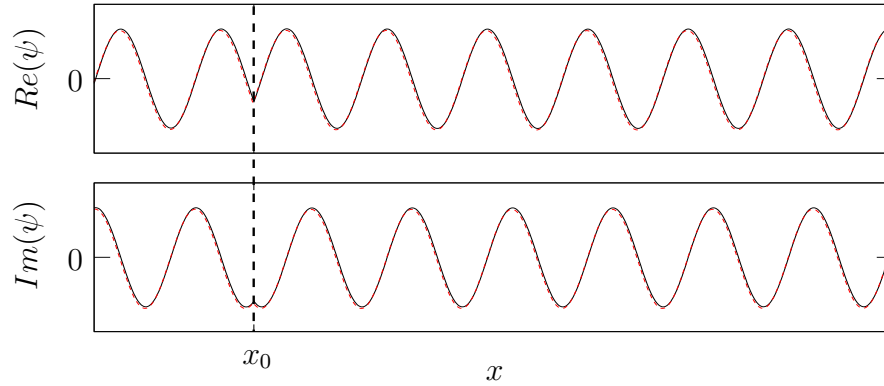
$$\tilde{\psi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{S_0}{ik} e^{ik|x'|} R(x'). \quad (6.99)$$

Nach einer kurzen Rechnung finden wir das Ergebnis

$$\tilde{\psi}(x) = \frac{S_0}{ik} \begin{cases} \frac{2}{k\Delta x} e^{-ikx} \sin(k\Delta x/2), & x < -\Delta x/2 \\ \frac{2}{k\Delta x} (1 - e^{ik\Delta x/2} \cos(kx)) & -\Delta x/2 < x < \Delta x/2 \\ \frac{2}{k\Delta x} e^{ikx} \sin(k\Delta x/2) & x > \Delta x/2 \end{cases} . \quad (6.100)$$

Im Limes  $\Delta x \rightarrow 0$  geht (6.100) in (6.98) über. Somit kann uns das Resultat (6.100) als Abschätzung für den Fehler dienen, den wir machen, wenn  $\delta(x)$  durch  $R(x)$  genähert wird; der relative Fehler  $\mathcal{F}_r$  ist durch den Faktor

$$\mathcal{F}_r = 1 - \frac{2}{k\Delta x} \sin(k\Delta x/2) \simeq \frac{k^2 \Delta x^2}{24}, \quad \text{für } \frac{k\Delta x}{2} \ll 1 \quad (6.101)$$



**Abbildung 6.4:** Dargestellt sind Real- und Imaginärteil einer numerisch generierten stationären ebenen Welle (schwarze Linien). Ein Vergleich mit der im Idealfall zu erwartenden Lösung  $\sqrt{n_1} \exp(-ik|x - x_0|)$  (rote, gestrichelte Linien) zeigt die hohe Präzision der von uns entwickelten numerischen Methode zur Implementierung des Quellterms; die Abweichung von der exakten Lösung liegen unter 0.5%.

bestimmt. Zur konkreten Durchführung von Rechnungen auf einem Gitter der Länge  $L$  hat es sich als günstig erwiesen, die Gitterzellengröße  $\Delta x$  gemäß  $L \simeq 20\Delta x$  zu wählen. Wenn wir den Quellterm also numerisch implementieren, sollte die Gittergröße  $\Delta x$  so gewählt werden, dass  $\mathcal{F}_r$  einen Wert möglichst nahe bei eins annimmt. Was die Wahl des Zeitintervalls angeht, so wird eine relevante Zeitskala durch den Exponenten in (6.95) vorgegeben, nämlich die Oszillationsperiode  $T_o = \mu^{-1}$  (Die Periode  $T_o$  ist wesentlich kleiner als das charakteristische Zeitintervall, auf dem sich die adiabatisch variierte Funktion  $f(t)$  ändert). Wir müssen also dafür Sorge tragen, dass  $\Delta t$  so gewählt wird, dass  $\Delta t \ll T_o$  gilt. Eine Wahl, die sich zur konkreten Umsetzung als günstig erwiesen hat, ist  $T_o \simeq 25\Delta t$ . Wir wollen den Quellterm nun in das implizite Integrationsschema (vgl. Abschnitt 6.2)

$$\mathbf{D}_2 \vec{\psi}^{n+1} = \mathbf{D}_1 \vec{\psi}^n \quad (6.102)$$

implementieren. Wir nehmen an, dass die Quelle am Gitterplatz  $x_{j'}$  lokalisiert sei. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.87) nimmt in der Gitterbasisdarstellung die Form

$$\begin{aligned} \psi_j^n - \frac{1}{2}i\Delta t \left[ -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n + U |\psi_j^n|^2 \psi_j^n + S_j^n \right] = \\ \psi_j^n + \frac{1}{2}i\Delta t \left[ -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^n + U |\psi_j^n|^2 \psi_j^n + S_j^n \right] \\ \text{mit } S_j^n = S_0 f(\Delta t n) \exp(-i\mu \Delta t n) \delta_{j,j'} \end{aligned} \quad (6.103)$$

an (es gilt  $t = \Delta t n$ ). Unter Verwendung der Definitionen (6.13) in Matrixform

geschrieben lautet dies

$$\begin{pmatrix}
 \ddots & & & & \\
 & -\alpha & 1 + \beta_{j'-1} & -\alpha & \\
 & & -\alpha & 1 + \beta_{j'} & -\alpha \\
 & & & -\alpha & 1 + \beta_{j'+1} & -\alpha \\
 & & & & \ddots & 
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 \psi_{j'-1}^{n+1} \\
 \psi_{j'}^{n+1} \\
 \psi_{j'+1}^{n+1} \\
 \vdots
 \end{pmatrix}
 +
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 0 \\
 \frac{i\Delta t}{2} S_{j'}^{n+1} \\
 0 \\
 \vdots
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 \ddots & & & & \\
 & \alpha & 1 - \beta_{j'-1} & \alpha & \\
 & & \alpha & 1 - \beta_{j'} & \alpha \\
 & & & \alpha & 1 - \beta_{j'+1} & \alpha \\
 & & & & \ddots & 
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 \psi_{j'-1}^n \\
 \psi_{j'}^n \\
 \psi_{j'+1}^n \\
 \vdots
 \end{pmatrix}
 -
 \begin{pmatrix}
 \vdots \\
 0 \\
 \frac{i\Delta t}{2} S_{j'}^n \\
 0 \\
 \vdots
 \end{pmatrix}. \quad (6.104)$$

Diese Matrixgleichung lässt sich mit (6.14) und (6.15) kompakt als

$$\mathbf{D}_2 \vec{\psi}^{n+1} + \vec{b}^n = \mathbf{D}_1 \vec{\psi}^n \quad (6.105)$$

schreiben, wobei die Komponenten des Vektors  $\vec{b}$  durch

$$b_j = \frac{i\Delta t}{2} (S_{j'}^n + S_{j'}^{n+1}) \delta_{j,j'} \quad (6.106)$$

definiert sind. Die Matrixgleichung (6.106) ist wieder von der Form  $\mathbf{A}\vec{X} = \vec{B}$  und kann damit numerisch durch eine Matrixinversionsroutine gelöst werden.

Die Exaktheit dieser numerischen Implementierung testen wir, indem wir in einem Wellenleiter ohne Potentialbarriere durch numerische Integration der Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Quellterm eine stationäre ebene Welle generieren, und diese mit dem im Idealfall zu erwartendem Ergebnis  $\sqrt{n_1} \exp(-ik|x - x_0|)$  vergleichen (vgl. Abb.6.4).

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Die Untersuchung von Bose-Einstein-Kondensaten in mesoskopischen Wellenleiterstrukturen hat sich in den vergangenen Jahren zu einem wichtigen Teilgebiet auf dem breiten Arbeitsfeld der Physik kalter Atome und Bose-Einstein-Kondensate entwickelt. Eine prominente Rolle spielt in diesem Zusammenhang Transport von Kondensaten in mesoskopischen Wellenleitergeometrien. Transportprozesse sind zum einen aus der Sicht der Grundlagenforschung von großer Bedeutung, da sich mit ihnen elementare quantenmechanische Fragestellungen in einem reinen und gut kontrollierbaren System untersuchen lassen; besonders interessant ist hierbei das Wechselspiel zwischen Transporteigenschaften des Kondensats und der Stärke der interatomaren Wechselwirkung. Zum anderen rechnet man damit, dass diese Transportprozesse in komplexen Wellenleitergeometrien von technologischer Relevanz für quanteninformationstechnische Anwendungen sein können.

Ein Ziel dieser Arbeit war es, Methoden zur Untersuchung von kohärenten Transport eines Bose-Einstein-Kondensats zu entwickeln und damit Transportprozesse durch verschiedene Potentialstrukturen zu betrachten, die gegenwärtig auch von hohem experimentellen Interesse sind. Der hier gewählte Zugang basiert auf der Gross-Pitaevskii-Gleichung, welche die *Mean-Field* Dynamik der makroskopischen Kondensatwellenfunktion beschreibt und einen wellenmechanische Zugang zu Transportprozessen erlaubt. Die interatomare Wechselwirkung wird durch einen nichtlinearen Term in der Wellengleichung beschrieben, der insbesondere bei Transportprozessen durch Doppelbarrierenpotentiale und Unordnungsregionen zu neuartigen dynamischen Prozessen führt.

Wir gaben am Beginn der Arbeit eine Einführung über gängige Fallenmechanismen, die im Zusammenhang mit Bose-Einstein-Kondensaten verwendet werden, und stellten die grundlegenden Konzepte zur Erzeugung mesoskopischer Wellenleiterstrukturen dar. Des Weiteren diskutierten wir Möglichkeiten zur Erzeugung von Quantenpunktkontakten und quantenpunktähnlichen Potentialstruktu-

ren, die sich im Rahmen der Atom-Chip Technologie realisieren lassen. Durch die experimentelle Beobachtung von Fragmentierung eines Kondensats in magnetischen Wellenleitern, nahe an Atom-Chip Oberflächen motiviert, entwickelten wir ein phänomenologisches Modell für magnetisch induzierte Unordnungspotentiale in quasi-eindimensionalen Wellenleitern. Dazu nahmen wir  $\delta$ -korrelierte örtliche Fluktuationen (weißes Rauschen) der stationären elektrischen Stromdichte im mikroskopischen Leiter, der den magnetischen Wellenleiter erzeugt, an; physikalisch entspricht diese Annahme dem Bild eines schmutzigen Leiters. Wir konnten zeigen, dass dieses magnetische Unordnungspotential entlang der Achse des Wellenleiters Lorentzartig korreliert ist und in guter qualitativer Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten steht [63].

Grundlage unserer wellenmechanischen Beschreibung von Transportprozessen ist die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung. Darum wurde in dieser Arbeit ausreichend Platz darauf verwendet, ihre Herleitung zu skizzieren und eine eindimensionale Version dieser Wellengleichung abzuleiten, denn oft können Bose-Einstein-Kondensate in magnetischen Wellenleitern (in adiabatischer Näherung), sehr gut als quasi-eindimensionale Objekte angesehen werden. Die stationären, einen Teilchenstrom tragenden Lösungen dieser eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung in einem uniformen Wellenleiter wurden ausführlich diskutiert, da sie grundlegend zur Definition von Streuzuständen sind. In diesem Zusammenhang erwies es sich als hilfreich, die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung in ein System von Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für die Amplitude der Kondensatwellenfunktion umzuformulieren; damit sind wir in der Lage, systematisch alle stationären Lösungen, auch für Wellenleiter mit zusätzlichen Barrierenpotentialen, zu finden.

Ein großer Teil dieser Arbeit ist der Entwicklung konzeptionell neuer Methoden zur Beschreibung eines kohärenten Kondensatflusses durch mesoskopische Potentialstrukturen gewidmet. In diesem Kontext wurden zunächst stromtragende Streuzustände mit wohldefinierten asymptotischen Eigenschaften für die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung eingeführt, die die Beschreibung stationärer Transportprozesse erlauben. Nichttrivial ist auch die Erweiterung der aus der linearen Quantenmechanik bekannten Größen der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten. Wir zeigten deswegen Verfahren auf, die als eine natürliche Erweiterung dieser Größen auf nichtlineare Wellengleichung, wie die Gross-Pitaevskii Gleichung, angesehen werden können.

Es genügt aber nicht, stationäre Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung zu untersuchen, da a priori jeder experimentell relevante Streuprozess von einem Kondensat an einem Barrierenpotential, zumindest temporär, zeitabhängig ist: Wie bei allen experimentell realisierbaren Transport- und Streuprozessen hat man es auch hier mit einem anfangs kondensatfreien Wellenleiter zu tun, in den ein kohärenter Kondensatfluss eingekoppelt wird; erst dadurch wird der Wellenlei-

ter in einem zeitabhängigen Prozess graduell mit Materiewellen gefüllt. Um zu untersuchen, ob ein stationärer Streuzustand besetzt wird, war es somit notwendig, die Zeitentwicklung der Kondensatwellenfunktion durch Integration der zeitabhängigen, um einen Quellterm erweiterten, Gross-Pitaevskii-Gleichung zu simulieren. Die Quelle repräsentiert die Ankopplung des Wellenleiters an ein Reservoir mit Bose-Einstein-kondensierten Atomen und emittiert monochromatische Materiewellen mit wohldefiniertem chemischen Potential. Dieser Ansatz erlaubt es, realistische kohärente Transportprozesse im Rahmen der *Mean-Field* Theorie zu simulieren und zu untersuchen, ob stationäre, dynamisch stabile Transportmoden populiert werden.

Wir entwickelten im Rahmen dieser Arbeit einen vielseitig einsetzbaren numerischen Apparat, der es erlaubt, die zeitliche Entwicklung eines Kondensats in beliebig komplexen, sogar zeitabhängigen Potentialstrukturen zu simulieren. In diesem Zusammenhang haben wir, speziell für die in dieser Arbeit betrachteten Problemstellungen, absorbierende Randbedingungen konzipiert, die artifizielle Rückreflexionen am Rande des nur endlich ausgedehnten numerischen Gitters unterbinden.

In dieser Arbeit wurden Transportprozesse von wechselwirkenden Kondensaten durch drei spezielle mesoskopische Potentialstrukturen betrachtet. Als einfachsten Fall untersuchten wir zunächst den Transport durch ein quantenpunktkontaktartiges Potential, nämlich einen Wellenleiter mit einem einzelnen Barrierenpotential, und berechneten nichtlineare Transmissionsspektren. Unsere Rechnungen zeigen, dass durch eine repulsive interatomare Wechselwirkung zwar nicht der aus der linearen Quantenmechanik bekannte qualitative Verlauf des Transmissionsspektrums grundlegend geändert wird, jedoch die Transmission mit zunehmender Wechselwirkung abnimmt.

Ein wesentlich komplexeres Verhalten zeigt sich beim Transport eines Kondensats durch ein symmetrisches Doppelbarrierenpotential, das als Fabry-Perot Resonator für Materiewellen angesehen werden kann. Das Hauptergebnis unserer Untersuchungen besteht darin, dass für repulsive Wechselwirkung resonanter Transport stark unterdrückt wird. Der Grund für dieses Verhalten konnte auf ein Bistabilitätsphänomen zurückgeführt werden: Die Nichtlinearität führt zu einer asymmetrischen Verschiebung der Breit-Wigner Resonanzen und zur Existenz dreier verschiedener stationärer Streuzustände bei ein und dem selben chemischen Potential. Es zeigte sich, dass lediglich der Zustand mit niedrigster Transmission besetzt wird, wenn man monochromatische Materiewellen in einen anfänglich leeren Wellenleiter einstrahlt. Wir konnten aber zeigen, dass der eigentlich unterdrückte resonante Zustand temporär populiert werden kann, wenn man das Doppelbarrierenpotential während des Transportprozesses adiabatisch absenkt [137]. Solch ein adiabatisches Kontrollschema könnte als Schaltkomponente für Kondensatflüsse in Wellenleitern in Hinblick auf Quanteninformationsprozesse von Nutzen



sein.

Als drittes Beispiel für Kondensattransport durch Wellenleiterstrukturen, untersuchten wir Transport durch mesoskopische Unordnungspotentiale im quasi-eindimensionalen Bild. [63]. Wir unterschieden dabei zwischen den Fällen von schwacher und starker Unordnung. Für den ersten Fall konnten wir mittels eines störungstheoretischen Ansatzes Abweichung von der perfekten Transmission  $T = 1$  analytisch abschätzen. Wir fanden auf Längenskalen, die viel kleiner als eine charakteristische Länge  $L_d$  sind (diese hängt von der Korrelationslänge des Unordnungspotentials und der *Healing* Länge des Kondensates ab), eine lineare Abnahmen der Transmission mit zunehmender Länge der Unordnungsregion. Eine Zunahme der repulsiven Atom-Atom Wechselwirkung führt zu einer Verminderung der Transmission. Zudem konnten wir ein semiklassisches Regime identifizieren: Ist die Unordnungskorrelationslänge viel größer als die de Broglie Wellenlänge, so wird die Rückreflexion exponentiell unterdrückt. Die von uns entwickelte Integrationsmethode erlaubte es, auch das Regime moderater und starker Unordnungspotentiale zu untersuchen. Für den Fall wechselwirkungsfreier Atome fanden wir in unseren Rechnungen zweifelsfrei das Auftreten von Lokalisierung, das heißt, die Transmission nimmt exponentiell mit zunehmender Länge  $L$  der Unordnungsregion ab.

Für repulsiv wechselwirkende Atome wird zeitabhängiges Verhalten eine dominierende Eigenschaft des Systems. Wir fanden, dass stationäre Streuzustände nur noch in Wellenleitern mit kurzen Unordnungsregionen besetzt werden, wohingegen das Kondensat eine stark zeitabhängige Dynamik aufweist, wenn wir Transport durch lange Unordnungsregionen simulieren. Unsere numerischen Rechnungen zeigen, dass die kritische Länge  $L^*$ , bei der der Übergang von stationären zu zeitabhängigen Verhalten eintritt, zu kürzeren Längen der Unordnungsregion hin verschoben wird, wenn man die Wechselwirkung, oder die mittlere Höhe des Unordnungspotentials vergrößert. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt bleibt die Bestimmung der kritischen Länge  $L^*$  ein noch offenes Problem, das weiterer numerischer und auch analytischer Studien bedarf. Auch für den nichtlinearen Fall haben wir die Abhängigkeit der Transmission von der Unordnungslänge  $L$  untersucht. Im zeitabhängigen Regime skaliert die zeitgemittelte Transmission invers zur Länge  $L$ ; dieses so genannte Ohmsche Verhalten ist charakteristisch für Systeme, in welchen ein Verlust von Phasenkohärenz auftritt. In der Tat verlieren wir Phaseninformation, wenn wir das Zeitmittel der Transmission berechnen. In diesem zeitabhängigen Regime ist das Konzept der Anderson-Lokalisierung nicht mehr anwendbar. Weitere numerische Rechnungen für sehr schwache Nichtlinearitäten, deuten aber darauf hin, dass das Szenario der Anderson-Lokalisierung auch für den wechselwirkenden Fall weiterhin gültig ist, solange stationäre Streuzustände in den Unordnungspotentialen besetzt werden.

Grundlage aller unserer Transportrechnungen war die Gross-Pitaevskii-Gleichung.

Einerseits erlaubt, wie in dieser Arbeit gezeigt, diese *Mean Field* Beschreibung der Kondensatwellenfunktion einen fundierten Zugang zur Untersuchung von Transportprozessen, andererseits sind dem hier entwickelten Zugang konzeptionelle Grenzen gesetzt: So liefert die Gross-Pitaevskii Theorie nur dann verlässliche Ergebnisse, wenn eine große Zahl von Atomen zum Transportprozess in der Mikrostruktur beiträgt; deswegen kann unser Formalismus nicht auf Transport von einigen wenigen kondensierten Atomen angewendet werden, weil dann das Konzept eines *Mean-Field* Zustandes für das Kondensat fragwürdig wird. Zudem ist bei Transport durch Wellenleitern stets darauf zu achten, dass der transversale Einschluss nicht so stark wird, dass das Tonks-Girardeau Regime erreicht wird, in dem sich wechselwirkende Bosonen wie Fermionen verhalten. Diese beiden Einschränkungen sind kontrollierbar, da bei allen, mit unserem Formalismus berechneten Resultaten, explizit nachgeprüft werden kann, ob das Gültigkeitsregime verlassen wurde. Eine weitere Einschränkung erfährt unser Gross-Pitaevskii basierter Ansatz dadurch, dass er nur für Temperaturen weit unterhalb der Kondensationstemperatur gültig ist.

Ein weiterer für Transportprozesse von Kondensaten wesentlicher Aspekt bleibt im Rahmen dieser Arbeit gänzlich unberücksichtigt: Aufgrund von Streuprozessen zwischen den kondensierten Atomen kann nämlich ein beträchtlicher Teil der Atome aus dem Kondensat gestreut werden. Es kann somit zu einer Verarmung des kondensierten Grundzustandes und - bei endlichen Temperaturen - zur Bildung einer inkohärenten thermischen Wolke unkondensierter Atome kommen [138]. Kondensat und thermische Wolke können miteinander in Wechselwirkung treten und somit zu einer Modifizierung der Transporteigenschaften führen. Dieser Sachverhalt sollte besonders in Bezug auf zeitabhängige Transportphänomene mit starker Dynamik von Relevanz sein, da dynamische Prozesse im Allgemeinen zu Anregungen aus dem Kondensat führen und die Bildung einer thermischen Wolke fördern. Im Kontext der in dieser Arbeit untersuchten Transportprozesse könnte dies im Hinblick auf den zeitabhängigen Transport durch Unordnungsregionen von Relevanz sein. Allerdings erwarten wir keine Änderung des Ohmschen Skalengesetzes, da die Wechselwirkung mit einer thermischen Wolke eine zusätzliche Quelle für inkohärenten Transport ist. Es bleibt aber abzuschätzen, wie stark eine etwaige Verarmung des Kondensats ausfällt, um zu entscheiden, ob in diesem Zusammenhang noch von Transport eines Kondensats gesprochen werden kann.

Die vorliegende Arbeit eröffnet Perspektiven für weiterführenden Studien zu kohärenten Transportprozessen. Zum einen hoffen wir, dass unsere theoretischen Vorhersagen bezüglich Transport durch die betrachteten speziellen Potentialstrukturen experimentelle Arbeiten anstoßen. Insbesondere die experimentelle Gruppe von C. Zimmermann ist an der Untersuchung von Transport durch Doppelbarrierenpotentialen auf dem Atom-Chip interessiert. Desweiteren gibt es in der Arbeitsgruppe von A. Aspect Vorbereitung für Transportexperimente, die den kohärenten Fluss eines Kondensats durch ein magnetisches Unordnungspotential

realisieren sollen. Zum anderen betrachten wir den von uns entwickelten Formalismus als solide Grundlage für weitere theoretische Arbeiten. Konkret denken wir dabei an die Simulation von Transport einzelner Wellenpakete durch Unordnungsregionen. Des Weiteren können, mit etwas erhöhtem numerischen Aufwand, Transportprozesse in realistischen dreidimensionalen Wellenleitern mit Unordnung simuliert werden, um den Einfluss zusätzlicher transversaler Freiheitsgrade zu studieren. Auch eröffnet sich die Perspektive, durch direkte Simulation der Kondensatwellenfunktion, das Verhalten von Bose-Einstein-Kondensaten in zweidimensionalen Unordnungsregionen in Hinblick auf das Phänomen der schwachen Lokalisierung zu untersuchen. Besonders der Einfluss der repulsiven Wechselwirkung dürfte hier von hervorgehobenem Interesse sein. Auch Propagationsprozesse von dunklen Solitonen werden mit unseren Methoden zugänglich; besonders interessant ist es in diesem Kontext - aufbauend auf die Arbeiten von N. Pavloff [139, 140] - zu untersuchen, ob ungestörte Propagation von Solitonen durch verschieden korrelierte Unordnungspotentiale möglich ist. Um die bereits angesprochenen Verarmungseffekte und die Bildung einer thermischen Wolke während des Transportes zu untersuchen, kann die in dieser Arbeit entwickelte Integrationsmethode unter Verwendung eines von T. Köhler und K. Burnett eingeführten quantendynamischen Kumulantenansatzes [83] erweitert werden. Damit erhält man ein gekoppeltes System von dynamischen Gleichungen, die Korrekturen zur Gross-Pitaevskii-Gleichung liefern und die Bildung von Anregungen aus dem Kondensat und einer thermischen Wolke, auch weit weg von Gleichgewichtszuständen, beschreiben.

Diese Arbeit spannt einen weiten Bogen von der Physik ultrakalter Bose-Einstein-Kondensate, über Vielteilchenwechselwirkungseffekte, hin zu nichtlinearen Phänomenen. Sie kann als ein erster Schritt zum Verständnis von Kondensattransport in mesoskopischen Potentialstrukturen angesehen werden. Dieses noch junge Arbeitsfeld hält mit Sicherheit noch viele spannende und überraschende physikalische Phänomene bereit, die ihrer Entdeckung harren.

# Kapitel 8

## Anhang

### 8.1 Quellterm in zylindersymmetrischen Wellenleitern

Von besonderer Relevanz sind in dieser Arbeit zylindersymmetrische Wellenleitergeometrien. Wir übertragen im Folgenden die im Abschnitt 4.3.5 für einen zweidimensionalen Wellenleiter entwickelte Methode zur Implementierung eines Quellterms auf eine dreidimensionale, zylindersymmetrische Konfiguration. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet in Zylinderkoordinaten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, r, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(x, r) + U_0 |\Psi(x, r, t)|^2 \right] \Psi(x, r, t) + S(t) \delta(x) e^{-i\mu t/\hbar} F(r); \quad (8.1)$$

$x$  bezeichnet die longitudinale Achse des Wellenleiters. Wir wollen lediglich um die Longitudinalachse rotationsinvariante Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung untersuchen, daher hängt die Wellenfunktion nur von  $x$  und der Radialkoordinate  $r$  ab. Wir verwenden den Separationsansatz

$$\Psi(x, r, t) = \psi(x) \phi(r) e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (8.2)$$

Dies ist eine Lösung der Wellengleichung (8.1), wenn wir  $F(r) = \phi(r)$  setzen;  $\phi(r)$  ist eine Transversalmode des Wellenleiters. Das heißt, wir können die Überlegungen aus Abschnitt 4.3.5 direkt übertragen, wir müssen lediglich die Transversalmode  $\phi(y)$  durch die hier relevante Mode des zylindersymmetrischen Wellenleiters ersetzen. Für die uns interessierenden Fälle ist  $\phi(r)$  immer die energetisch niedrigste Transversalmode. Der Strom  $I$ , der von einer Wellenfunktion  $\psi(x, r, t)$

getragen wird, errechnet sich dann über das Integral

$$I(x, t) = 2\pi \int_0^\infty r dr j(x, r, t); \quad (8.3)$$

hier ist  $j(x, r, t)$  die Stromdichte der Wellenfunktion  $\psi(x, r, t)$ .

## 8.2 Näherungsweise Bestimmung von evaneszenten Moden

Wir zeigen hier eine Methode auf, die es erlaubt, das Bild der evaneszenten Moden auch auf den nichtlinearen Fall zu erweitern. Wir zerlegen die Kondensatwellenfunktion gemäß

$$\Psi(x, r) = \psi_0(x)\phi_0(x, r) + \sum_{\alpha>0} \psi_\alpha(x)\phi_\alpha(x, r). \quad (8.4)$$

Hierbei ist  $\phi_0$  der adiabatische Grundzustand des Bose-Einstein-Kondensates und die Wellenfunktionen  $\phi_\alpha$  (mit  $\alpha > 0$ ) sind die höheren Transversalmoden des *linearen* zylindersymmetrischen harmonischen Oszillators (die Moden hängen wegen der Orstabhängigkeit der Transversalfrequenz parametrisch von  $x$  ab). Es ist anzumerken, dass (8.4) keine orthogonale Zerlegung ist, da  $\langle \phi_0 | \phi_\alpha \rangle \neq 0$  (für  $\alpha > 0$ ). Unter der Annahme, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit der Moden mit  $\alpha > 0$  klein ist, können wir den nichtlinearen Term in der Gross-Pitaevskii-Gleichung durch  $U_0|\psi_0|^2|\phi_0|^2$  sehr gut approximieren. Dann wird der Grundzustand  $\phi_0$  durch die Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_q(x, r) + U_0|\psi_0|^2|\phi_0|^2 \right] \phi_0 = \epsilon |\phi_0|^2 \phi_0 \quad (8.5)$$

bestimmt (vgl. Abschnitt 3.2.2). Die höheren Moden gehorchen der Gleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_q(x, r) \right] \phi_\alpha = E_\alpha(x) \phi_\alpha, \quad (8.6)$$

wobei  $E_\alpha$  die parametrisch von  $x$  abhängigen Energieeigenwerte sind. Setzt man nun die Wellenfunktion (8.4) in die dreidimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung ein, so erhält man, unter Berücksichtigung von (8.5) und (8.6)

$$\begin{aligned} \mu \sum_{\alpha \geq 0} \psi_\alpha \phi_\alpha &= \sum_{\alpha} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi_\alpha \phi_\alpha) + \right] + \epsilon |\phi_0|^2 \psi_0 \phi_0 + \\ &+ \sum_{\alpha \geq 0} [E_\alpha(x) + U_0|\psi_0|^2|\phi_0|^2] \psi_\alpha \phi_\alpha. \end{aligned} \quad (8.7)$$

Aus dieser Gleichung kann man nun rekursiv die Anregungen der höheren Moden bestimmen; dazu löst man zunächst diese Gleichung, indem man nur den Summanden mit  $\alpha = 0$  berücksichtigt. Damit erhält man die adiabatische Lösung  $\phi_0$ . Diese setzen wir in (8.7) ein und berücksichtigen nun zusätzlich den Summanden mit  $\alpha = 1$ . Nimmt man nun an, dass das chemische Potential, weit weg vom Quantenpunktkontakt, die Ungleichungen  $\epsilon(|\phi_0|^2) < \mu < E_1$  erfüllt, so finden wir unter Berücksichtigung der daraus resultierenden asymptotischen Randbedingung  $\phi_1 \rightarrow 0$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  die Besetzung der ersten angeregten Mode  $\phi_1$ . Wegen der Bedingung, dass  $\phi_1$  im unendlichen verschwindet, handelt es sich bei dieser Mode wieder um eine evaneszente Mode. In rekursiver Weise können wir  $\phi_0$  und  $\phi_1$  wiederum in (8.7) einsetzen und damit  $\phi_2$  und die Besetzung höherer, evaneszenter Moden berechnen. In der Praxis zeigt sich, dass man dieses Verfahren nach  $\alpha = 2$  abbrechen kann, da die Beiträge höherer Moden rasch abklingen. Diese Methode erlaubt es im Regime kleiner Besetzungswahrscheinlichkeiten für die höheren Moden Korrekturen zu den adiabatisch errechneten Transmissionen zu finden.

### 8.3 Resonanzen für $\delta$ -förmige Doppelbarrieren-potentiale

Wir zeigen in diesem Anhang einen Weg auf, wie die Positionen der Resonanzen im Spezialfall sehr enger Gaußbarrieren, die durch ein  $\delta$ -förmiges Potential idealisiert werden, analytisch bestimmt werden können; wir betrachten also ein Potential der Form

$$V(x) = V_0 [\delta(x + L/2) + \delta(x - L/2)]. \quad (8.8)$$

Wir verwenden dazu die zu (5.17) äquivalente integrale Form (3.86) der Gross-Pitaevskii-Gleichung. Da wir an Resonanzen interessiert sind, suchen wir Lösungen, mit  $n(x) = n_1$  für  $x < -L/2$  und  $x > L/2$  (vgl. auch Abb.5.6). Wir betrachten der Einfachheit halber die erste Resonanz. Wir integrieren (5.17) von links nach rechts und wählen für die untere Integrationsgrenze die Position der rechten  $\delta$ -Barriere, also  $x_0 = -L/2$ ; für die obere Grenze setzen wir  $x = 0$ . Damit finden wir die Bedingung

$$2 \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \int_{A(x_0)}^{A(x_0+L/2)} \frac{dA}{\sqrt{E_r - \frac{mj_t^2}{2A^2} - \mu A^2 + \frac{1}{2}gA^4}} = L. \quad (8.9)$$

$L$  ist dann genau die Länge, für die bei gegebenen Werten  $\mu$ ,  $g$  und  $j_t$  die erste Resonanz zu finden ist, beziehungsweise wird durch diese Integralgleichung das

chemische Potential bestimmt, wenn wir  $L$  vorgeben. Wir müssen nun noch den Wert der klassischen Energie  $E$  bestimmen. In der Upstream- bzw. Downstream-Region ist diese Energie durch den Minimalwert  $E_u$  des klassischen Potentials  $W(A^2)$  festgelegt, da dort für die Dichte  $n(x) = n_1$  gelten soll. Zwischen den Barrieren ist  $E$  aber größer, da im Bilde des fiktiven klassischen Teilchens das Barrierenpotential einen Energieübertrag  $\Delta E$  auf das Teilchen bewirkt.  $\Delta E$  kann leicht berechnet werden, wenn man die Stetigkeit der Amplitude  $A(x)$  berücksichtigt; insbesondere gilt zum Beispiel bei der rechten Barriere  $A(L/2 - 0) = A(L/2 + 0)$ . Die Bewegungsgleichung für  $A$  lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A'' + \frac{mj_t^3}{2A^3} + gA^3 + V_0\delta(x - L/2) = \mu A. \quad (8.10)$$

Integrieren wir dies nun wie folgt

$$\int_{L/2-s}^{L/2+s} dx \left( -\frac{\hbar^2}{2m}A'' + \frac{mj_t^3}{2A^3} + gA^3 + V_0\delta(x - L/2) \right) = \int_{L/2-s}^{L/2+s} dx \mu A \quad (8.11)$$

und betrachten den Limes  $s \rightarrow 0$ , so finden wir unter Verwendung der Stetigkeit von  $A$

$$A'(L/2 + 0) - A'(L/2 - 0) = 2mV_0A(L/2)/\hbar. \quad (8.12)$$

Damit können wir mittels der Beziehung

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(A')^2 + \frac{m}{2A^2}j^2 + A^2 - \frac{g}{2}A^4 \quad (8.13)$$

den Energieübertrag zu

$$\Delta E = \frac{2m}{\hbar^2}V_0^2[A(L/2)]^2 \quad (8.14)$$

bestimmen. Da wir einen resonanten Zustand untersuchen, gilt  $[A(L/2)]^2 = n_1$ . Die Energie  $E_r$ , die relevant für den resonanten Zustand ist, hat damit also den Wert

$$E_r = E_u + \frac{2m}{\hbar^2}V_0^2n_1^2. \quad (8.15)$$

Setzen wir (8.15) in (8.9) ein, so haben wir damit eine implizite Integralgleichung gewonnen, die es z.B. durch numerisches Lösen erlaubt, die Position der ersten Resonanz im Transmissionsspektrum zu bestimmen. (Die Positionen der anderen Resonanzen können durch eine ähnliche analytische Betrachtung gewonnen werden, dabei muss aber beachtet werden, dass bei der Integration zwischen dem positiven und negativen Zweig von (3.86) gewechselt werden muss). Mit dem

hier aufgezeigten analytischen Ansatz kann man die numerisch errechneten Ergebnisse für die Resonanzpositionen überprüfen, wenn man sich im Regime sehr enger Gaußförmiger Barrieren befindet. Für die Resonanz aus Abb.5.9 finden wir mit (8.15) und (8.9) den Wert  $\mu = 0.624$ . Dies stimmt sehr gut mit dem numerisch gefundenen Wert  $\mu = 0.631$  überein, da wir für dieses Beispiel sehr enge Gaußförmiger Barrieren angenommen haben.

## 8.4 Zusammenhang zwischen Korrelation und Transmission

In diesem Anhang leiten wir einen Zusammenhang zwischen der gemittelten Transmission  $\langle T \rangle$  und der Korrelationsfunktion des Unordnungspotentials her. Der Mittelwert von Gleichung (5.40) lautet

$$\langle T \rangle = 1 - \frac{1}{4} \left\{ \langle [\delta\rho(0)]^2 \rangle + \frac{1}{4\kappa^2} \langle [\delta\rho'(0)]^2 \rangle \right\}. \quad (8.16)$$

Somit reduziert sich das Problem  $\langle T \rangle$  auf das Auswerten der Mittelwerte

$$\begin{aligned} \langle [\delta\rho(0)]^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\delta\rho_i(0)]^2, \\ \langle [\delta\rho'(0)]^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\delta\rho'_i(0)]^2. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Gleichung (5.35) erlaubt es, dies in der Form

$$\begin{aligned} \langle [\delta\rho(0)]^2 \rangle &= \frac{k^4}{\kappa^2} \int_0^L dx \sin(2\kappa x) \int_0^L dx' \sin(2\kappa x') \langle u(x)u(x') \rangle, \\ \langle [\delta\rho'(0)]^2 \rangle &= 4k^2 \int_0^L dx \cos(2\kappa x) \int_0^L dx' \cos(2\kappa x') \langle u(x)u(x') \rangle \end{aligned} \quad (8.18)$$

zu schreiben, wobei  $\langle u(x)u(x') \rangle$  die Korrelationsfunktion des Unordnungspotentials ist. Wir werten  $\langle T \rangle$  für die besonders interessanten Fälle eines  $\delta$ -korrelierten und eines Lorentzkorrelierten Unordnungspotentials aus. Im ersten Fall lautet die Korrelationsfunktion

$$\langle u(x)u(x') \rangle = \gamma \left( \frac{2m}{\hbar^2 k^2} \right)^2 \pi \delta(x - x'), \quad (8.19)$$



und die Integrale in (8.18) können einfach mittels partieller Integration ausgewertet werden. Dies führt zu dem Ergebnis

$$\begin{aligned}\langle [\delta\rho(0)]^2 \rangle &= \frac{2m^2\gamma\pi}{\hbar^4\kappa^2} L + c \\ \langle [\delta\rho'(0)]^2 \rangle &= 4\kappa^2 \langle [\delta\rho(0)]^2 \rangle,\end{aligned}\quad (8.20)$$

wobei  $c$  eine dimensionslose Konstante von der Größenordnung  $(4\gamma\pi m^2)/(\hbar^4\kappa^3)$  ist. Für Längen  $L$  der Unordnungsregion mit  $L \gg \kappa^{-1}$  können wir  $c$  vernachlässigen und behalten lediglich Terme, die linear in  $L$  skalieren. Verwenden wir diese Näherung, so finden wir mit (8.16) für ein  $\delta$ -korreliertes Unordnungspotential

$$\langle T \rangle = 1 - \frac{\pi m^2 \gamma L}{\hbar^4 \kappa^2}. \quad (8.21)$$

Im Falle eines Lorentzkorrelierten Potentials

$$\langle u(x)u(x') \rangle = \gamma \left( \frac{2m}{\hbar^2 \kappa^2} \right)^2 \frac{l_c}{l_c^2 + (x - x')^2}, \quad (8.22)$$

ist eine exakte Auswertung der Integralausdrücke (8.18) nicht möglich. Dennoch kann im Regime  $L \gg l_c$  und  $L \gg 1/\kappa$  das innere Integral in (8.18) mit sehr guter Genauigkeit durch den Real- bzw. Imaginärteil der Relation

$$\int_0^L \frac{1}{\pi} \frac{l_c e^{2i\kappa x'} dx'}{l_c^2 + (x - x')^2} \simeq e^{2\kappa(ix - l_c)} [\Theta(x) - \Theta(x - L)] \quad (8.23)$$

genähert werden. Wenden wir zur Auswertung des äußeren Integrals wieder die partielle Integration an, so finden wir für  $\langle T \rangle$  das Ergebnis

$$\langle T \rangle = 1 - \frac{\pi m^2 \gamma L}{\hbar^4 \kappa^2} e^{-2\kappa l_c}. \quad (8.24)$$

## 8.5 WKB Methode im semiklassischen Regime

In diesem Anhang zeigen wir, dass die Näherungsformel (5.46) auch ausgehend von einem Standard-WKB Ansatz [141] hergeleitet werden kann. Setzen wir den WKB-Ansatz  $\psi(x) = \exp(if(x))$  (wobei  $f(x)$  eine komplexe Funktion sei) in die stationäre Gross-Pitaevskii-Gleichung ein, so finden wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [if'' - (f')^2] + V_u(x) + g e^{i(f-f^*)} = \mu. \quad (8.25)$$

Wir nehmen an, das Unordnungspotential  $V_u(x)$  sei klein, im Vergleich zum chemischen Potential  $\mu$ , und seine Korrelationslänge  $l_c$  groß, verglichen mit der de Broglie Wellenlänge. Gleichung (8.25) kann in die selbstkonsistente Form

$$f' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\mu - V_u(x) - g e^{i(f-f^*)})} + i f'' \quad (8.26)$$

gebracht werden; damit können wir rekursiv die unbekannte Funktion  $f(x)$  bestimmen. Da  $V_u(x)$  als kleine Störung angenommen wurde, rechtfertigt dies, als Näherung nullter Ordnung eine ebene Welle mit Dichte  $n_0$  und Wellenvektor  $k$  als Anfangskonfiguration für die Rekursion zu nehmen

$$f^{(0)} = k x - i \ln(\sqrt{n_0}). \quad (8.27)$$

Mit der Rekursionsrelation (8.26) finden wir

$$f^{(1)'} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m (\mu - V_u(x) - g n_0)} \equiv \frac{1}{\hbar} \tilde{P}(x); \quad (8.28)$$

In Näherung erster Ordnung lautet die Wellenfunktion also

$$\psi^{(1)}(x) = \sqrt{n_0} \exp \left( i \int_a^x \frac{1}{\hbar} \tilde{P}(x') dx' \right). \quad (8.29)$$

Die untere Integrationsgrenze  $a$  liegt in der Downstream-Region, wo wir ein Kondensat mit konstanter Dichte  $n_0$  annehmen. Setzen wir die zweite Ableitung

$$f^{(1)''} = -\frac{m}{\hbar \tilde{P}(x)} V_u'(x) = \frac{1}{\hbar} \tilde{P}'(x) \quad (8.30)$$

in die selbstkonsistente Gleichung (8.26) ein, erhalten wir die Näherung zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} f^{(2)'} &= \frac{\tilde{P}(x)}{\hbar^2} \sqrt{1 + i \hbar \tilde{P}'(x) / (\tilde{P}(x))^2} \\ &\simeq \frac{\tilde{P}(x)}{\hbar} + i \frac{\tilde{P}'(x)}{2 \tilde{P}(x)}. \end{aligned} \quad (8.31)$$

Durch Integration finden wir die Näherung zweiter Ordnung für die Wellenfunktion

$$\psi^{(2)}(x) = \sqrt{n_0} \sqrt{\frac{\tilde{P}(a)}{\tilde{P}(x)}} \exp \left( i \int_a^x \frac{1}{\hbar} \tilde{P}(x') dx' \right). \quad (8.32)$$

Somit ist die Kondensatdichte, die wir mittels der WKB-Methode gefunden haben

$$n(x) = \frac{\tilde{P}(a)}{\tilde{P}(x)} = \frac{n_0}{\sqrt{1 - u(x)}}, \quad (8.33)$$

wobei  $u(x) \equiv V_u(x) / (\mu - g n_0) = V_u(x) 2m / (\hbar^2 k^2)$  ist. Dieses Ergebnis stimmt mit dem Resultat (5.46), das wir aus den hydrodynamischen Gleichungen hergeleitet haben, überein.

# Literaturverzeichnis

- [1] S. N. Bose, Z. Phys. **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematische Klasse 261 (1924).
- [3] L. Pitaevskii und S. Stringari, in *Bose-Einstein Condensation* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [4] K. Bongs und K. Sengstock, *Physics with coherent matter waves*, Rep. Prog. Phys. **67**, 907 (2004).
- [5] W. Ketterle, D. Durfee und D. Stamper-Kurn, in *Bose-Einstein condensation in atomic gases, Proceedings of the International School of Physics, Enrico Fermi*, edited by M. Inguscio, S. Stringari und C. Wieman (IOS Press, Amsterdam, 1999).
- [6] C. S. Adams und E. Riis, *Laser Cooling and Trapping of Neutral Atoms* (Elsevier Science Ltd, Amsterdam, 1997).
- [7] H. Haken und H. Wolf, *Atom- und Quantenphysik* (Springer, Berlin, 2003).
- [8] H. J. Metcalf und P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping* (Springer, Berlin, 1999).
- [9] H. F. Hess, *Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen*, Phys. Rev. B **34**, 3476 (1986).
- [10] W. Ketterle und N. J. van Druten, *Evaporative cooling of trapped atoms.*, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **37**, 181 (1996).
- [11] D. E. Pritchard, *Cooling Neutral Atoms in a Magnetic Trap for Precision Spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **51**, 1336 (1983).
- [12] W. Ketterle, K. B. Davis, A. M. Michael A. Joffe und D. E. Pritchard, *High densities of cold atoms in a dark spontaneous-force optical trap*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2253 (1993).

- [13] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [14] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [15] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [16] C. C. Bradley, C. A. Sackett und R. G. Hulet, *Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number*, Phys. Rev. Lett. **78**, 985 (1995).
- [17] Y. Shin, C. Sanner, G. B. Jo, T. A. Pasquini, M. Saba, W. Ketterle, D. E. Pritchard, M. Vengalattore und M. Prentiss, *Interference of Bose-Einstein condensates split with an atom chip*, Phys. Rev. A **72**, 021604 (2005).
- [18] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Observation of Interference Between Two Bose Condensates*, Science **275**, 637 (1997).
- [19] D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, S. Inouye, M. R. Andrews und W. Ketterle, *Collisionless and Hydrodynamic Excitations of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **81**, 500 (98).
- [20] C. Menotti und S. Stringari, *Collective oscillations of a one-dimensional trapped Bose-Einstein gas*, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002).
- [21] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch und I. Bloch, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415**, 39 (2002).
- [22] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels und W. Ketterle, *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*, Science **292**, 476 (2000).
- [23] M. R. Andrews, D. M. Kurn, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, C. G. Townsend, S. Inouye und W. Ketterle, *Propagation of Sound in a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **79**, 553 (1997).
- [24] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans und C. Salomon, *Experimental Study of the BEC-BCS Crossover Region in Lithium 6*, Phys. Rev. Lett. **93**, 050401 (2004).

- 
- [25] L. Deng, E. W. Hagley, J. Wen, M. Trippenbach, Y. Band, P. S. Julienne, J. E. Simsarian, K. Helmerson, S. L. Rolston und W. D. Phillips, *Four-wave mixing with matter waves*, Nature **398**, 218 (1999).
- [26] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott und R. G. Hulet, *Formation and propagation of matter-wave soliton trains*, Nature **417**, 150 (2002).
- [27] S. Burger, Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer und K. Sengstock, *Dark Solitons in Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5198 (1999).
- [28] L. Fallani, L. D. Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort und M. Inguscio, *Observation of Dynamical Instability for a Bose-Einstein Condensate in a Moving 1D Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **93**, 140406 (2004).
- [29] D. Witthaut, M. Werder, S. Mossmann, und H. J. Korsch, *Bloch oscillations of Bose-Einstein condensates: Breakdown and revival*, Phys. Rev. E **71**, 036625 (2005).
- [30] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort und M. Inguscio, *Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **95**, 070401 (2005).
- [31] C. Fort, L. Fallani, V. Guarrera, J. Lye, M. Modugno, D. S. Wiersma und M. Inguscio, *Effect of optical disorder and single defects on the expansion of a Bose-Einstein condensate in a one-dimensional waveguide*, Phys. Rev. Lett. **95**, 170410 (2005).
- [32] T. Schulte, S. Drenkelforth, J. Kruse, W. Ertmer, J. Arlt, K. Sacha, J. Zakrzewski und M. Lewenstein, *Routes towards Anderson localization of Bose-Einstein condensates in disordered optical lattices*, Phys. Rev. Lett. **95**, 170411 (2005).
- [33] *Anderson Localization*, edited by T. Ando und H. Fukuyama (Springer, Heidelberg, 1988).
- [34] V. Vuletic, T. Fischer, M. Praeger, T. W. Hänsch und C. Zimmermann, *Microscopic Magnetic Quadrupole Trap for Neutral Atoms with Extreme Adiabatic Compression*, Phys.Rev.Lett. **80**, 1634 (1998).
- [35] J. Fortagh, A. Grossmann, , C. Zimmermann und T. W. Hänsch, *Miniaturized Wire Trap for Neutral Atoms*, Phys.Rev.Lett. **81**, 5310 (1998).
- [36] R. Folman, P. Krüger, D. Cassettari, B. Hessmo, T. Maier und J. Schmiedmayer, *Controlling Cold Atoms using Nanofabricated Surfaces: Atom Chips*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4749 (2000).

- [37] W. Hänsel, P. Hommelhoff, T. W. Hänsch und J. Reichel, *Bose-Einstein Condensation on a microelectronic chip*, Nature **413**, 498 (2001).
- [38] H. Ott, J. Fortagh, G. Schlotterbeck, A. Grossmann und C. Zimmermann, *Bose-Einstein Condensation in a Surface Microtrap*, Phys. Rev. Lett. **87**, 230401 (2001).
- [39] K. Brugger, T. Calarco, D. Cassetari, R. Folman, A. Haase, B. Hessmo, P. Krüger, T. Maier und J. Schmiedmayer, *Nanofabricated atom optics: atom Chips*, J. Mod. Opt. **47**, 2789 (2000).
- [40] K. Richter, *Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems* (Springer, Berlin Heidelberg, 2000).
- [41] E. Andersson, T. Calarco, R. Folman, M. Andersson, B. Hessmo und J. Schmiedmayer, *Multimode Interferometer for Guided Matter Waves*, Phys. Rev. Lett. **88**, 100401 (2002).
- [42] T. Schumm, S. Hofferberth, L. M. Andersson, S. Wildermuth, S. Groth, I. Bar-Joseph und P. K. J. Schmiedmayer, *Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip*, Nature Physics **1**, 57 (2005).
- [43] W. Hänsel, J. Reichel, P. Hommelhoff und T. W. Hänsch, *Magnetic Conveyor Belt for Transporting and Merging Trapped Atom Clouds*, Phys. Rev. Lett. **86**, 608 (2001).
- [44] A. E. Leanhardt, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, T. L. Gustavson, W. Ketterle und D. E. Pritchard, *Propagation of Bose-Einstein Condensates in a Magnetic Waveguide*, Phys. Rev. Lett. **89**, 040401 (2002).
- [45] H. Ott, J. Fortágh, S. Kraft, A. Günther, D. Komma und C. Zimmermann, *Nonlinear Dynamics of a Bose-Einstein Condensate in a Magnetic Waveguide*, Phys.Rev.Lett. **91**, 040402 (2003).
- [46] J. Estève, C. Aussibal, T. Schumm, C. Figl, D. Mailly, I. Bouchoule, C. I. Westbrook und A. Aspect, *Role of wire imperfections in micromagnetic traps for atoms*, Phys. Rev. A **70**, 043629 (2004).
- [47] T. Schumm, J. Estève, C. Figl, J.-B. Trebbia, C. Aussibal, H. Nguyen, D. Mailly, I. Bouchoule, C. Westbrook und A. Aspect, *Atom chips in the real world: the effects of wire corrugation*, Eur. Phys. J. D **32**, 171 (2005).
- [48] D. Ferry und S. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [49] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

- [50] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley and Sons, New York, 1999).
- [51] C. J. Pethick und H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge UK, 2002).
- [52] P. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen und B. J. Verhaar, *Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering*, Phys. Rev. Lett. **81**, 69 (1998).
- [53] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn und W. Ketterle, *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate*, Nature **392**, 151 (1998).
- [54] Y. Imry und R. Landauer, *Conductance viewed as transmission*, Rev. Mod. Phys. **71**, 306 (1999).
- [55] J. H. Thywissen, R. M. Westervelt und M. Prentiss, *Quantum Point Contacts for Neutral Atoms*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3762 (1999).
- [56] A. Recati, P. O. Fedichev, W. Zwerger, J. von Delft und P. Zoller, *Atomic Quantum Dots Coupled to a Reservoir of a Superfluid Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **94**, 040404 (2005).
- [57] I. Carusotto, *Nonlinear atomic Fabry-Perot interferometer: From the mean-field theory to the atom blockade effect*, Phys. Rev. A **63**, 023610 (2001).
- [58] T. Chakraborty, *Quantum Dots* (Elsevier, Amsterdam, 1999).
- [59] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii und S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [60] Typische Dichten von stark verdünnten Bose-Kondensaten liegen im Bereich von  $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ; zum Vergleich: Die Dichte von Luft in der Erdatmosphäre beträgt  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .
- [61] Y. Castin und R. Dum, *Bose-Einstein Condensates in Time Dependent Traps*, Phys. Rev. Lett. **77**, 5315 (1996).
- [62] T. Paul, K. Richter und P. Schlagheck, in preparation.
- [63] T. Paul, P. Leboeuf, N. Pavloff, K. Richter und P. Schlagheck, *Nonlinear Transport of Bose-Einstein Condensates Through Waveguides with Disorder*, Phys. Rev. A **72**, 063621 (2005).
- [64] P. W. Anderson, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).

- 
- [65] F. Schwabl, *Quantenmechanik - QMI* (Springer, Heidelberg, 2002).
- [66] W. H. Wing, , Prog. Quantum Electronics **8**, 181 (1984).
- [67] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg, New-York, 1998).
- [68] R. Frisch und E. Segre, Z. f. Physik **75**, 610 (1933).
- [69] R. Folman, P. Krüger, J. Denschlag, C. Henkel und J. Schmiedmayer, *Microscopic atom optics: From wires to an Atom Chip*, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **48**, 263 (2002).
- [70] J. Fortágh, A. Grossmann, T. W. Hänsch und C. Zimmermann, *Fast loading of a magneto-optical trap from a pulsed thermal source*, Jour. App. Phys. **84**, 6499 (1998).
- [71] P. Leboeuf und N. Pavloff, *Bose-Einstein beams: Coherent propagation through a guide*, Phys. Rev. A **64**, 033602 (2001).
- [72] P. Das, *Lasers and optical engineering* (Springer, New York, 1991).
- [73] Privater Informationsaustausch mit Michael Albiez, Heidelberg.
- [74] D. Clément, A. F. Varón, M. Hugbart, J. A. Retter, P. Bouyer, L. Sanchez-Palencia, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov und A. Aspect, *Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **95**, 170409 (2005).
- [75] C. Henkel und M. Wilkens, *Heating of trapped atoms near thermal surfaces*, Europhys. Lett. **47**, 414 (1999).
- [76] C. Henkel und S. A. Gardiner, *Decoherence of Bose-Einstein condensates in microtraps*, Phys. Rev. A **69**, 043602 (2004).
- [77] J. Fortágh, H. Ott, S. Kraft, A. Günther und C. Zimmermann, *Surface effects in magnetic microtraps*, Phys. Rev. A **66**, 041604(R) (2002).
- [78] S. Kraft, A. Günther, H. Ott, D. Wharam, C. Zimmermann und J. Fortágh, *Anomalous longitudinal magnetic field near the surface of copper conductors*, Physica B **35**, L469 (2002).
- [79] D.-W. Wang, M. D. Lukin und E. Demler, *Disordered Bose-Einstein Condensates in Quasi-One-Dimensional Magnetic Microtraps*, Phys. Rev. Lett. **92**, 076802 (2004).
- [80] *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. Abramowitz und I. Stegun (Dover Publications, New York, 1972).



- 
- [81] A. J. Legget, *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts*, Rev. Mod. Phys. **73**, 307 (2001).
  - [82] J. F. Annett und H. H. Wills, *Superconductivity, Superfluids, and Condensates* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
  - [83] T. Köhler und K. Burnett, *Microscopic quantum dynamics approach to the dilute condensed Bose gas*, Phys. Rev. A **65**, 033601 (2002).
  - [84] *Scattering Theory* (John Wiley, New York, 1972).
  - [85] M. Olshanii, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
  - [86] L. Tonks, *The Complete Equation of State of One, Two and Three-Dimensional Gases of Hard Elastic Spheres*, Phys. Rev. **50**, 955 (1936).
  - [87] M. D. Girardeau und E. M. Wright, *Bose-Fermi Variational Theory of the Bose-Einstein Condensate Crossover to the Tonks Gas*, Phys. Rev. Lett. **87**, 210401 (2001).
  - [88] V. Dunjko, V. Lorent und M. Olshanii, *Bosons in Cigar-Shaped Traps: Thomas-Fermi Regime, Tonks-Girardeau Regime, and In Between*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5413 (2001).
  - [89] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics I* (Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1971).
  - [90] F. Bowman, *Introduction to Elliptic Functions with Applications* (Dover, New York, 1961).
  - [91] K. Rapedius, D. Witthaut und H. J. Korsch, *An analytical study of resonant transport of Bose-Einstein condensates*, cond-mat/0507679 (2005).
  - [92] K. Rapedius, Master's thesis, Technische Universität Kaiserslautern, 2005.
  - [93] H. Lamb, *Hydrodynamics* (Cambridge University Press, ADDRESS, 1997).
  - [94] P. Leboeuf, N. Pavloff und S. Sinha, *Solitonic transmission of Bose-Einstein matter waves*, Phys. Rev. A **68**, 063608 (2003).
  - [95] R. Abraham und J. Marsden, *Foundations of Mechanics* (The Benjamin Cummings Publishing Company, INC., Reading (Massachusetts), 1978).
  - [96] F. Kuypers, *Klassische Mechanik* (Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 1997).
  - [97] R. Knapp, G. Papanicolaou und B. White, *Transmission of Waves by a Nonlinear Random Medium*, J. Stat. Phys. **63**, 567 (1991).

- 
- [98] S. A. Gredeskul und Y. S. Kivshar, *Propagation and scattering of nonlinear waves in disordered systems*, Phys. Rep **216**, 1 (1992).
- [99] B. Wu und Q. Niu, *Landau and dynamical instabilities of the superflow of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Phys. Rev. A **64**, 061603 (2001).
- [100] Y. Shin, M. Saba, M. Vengalattore, T. A. Pasquini, C. Sanner, A. E. Leanhardt, M. Prentiss, D. E. Pritchard und W. Ketterle, *Dynamical Instability of a Doubly Quantized Vortex in a Bose-Einstein Condensate*, Phys.Rev.Lett. **93**, 160406 (2004).
- [101] I. Bloch, T. W. Hänsch und T. Esslinger, *Atom Laser with a cw Output Coupler*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3008 (1998).
- [102] J. McKeeever<sup>1</sup>, A. Boca, A. D. Boozer, J. R. Buck und H. J. Kimble, *Experimental realization of a one-atom laser in the regime of strong coupling*, Nature **425**, 268 (2003).
- [103] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, New York, 1971).
- [104] I. Gradshteyn und I. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic Press, New York and London, 1965).
- [105] Privater Informationsaustausch mit Jozsef Fortágh, Tübingen.
- [106] M. Jääskeläinen und S. Stenholm, *Adiabatic propagation in potential structures*, Phys. Rev. A **66**, 023608 (2002).
- [107] M. Jääskeläinen und S. Stenholm, *Localization in splitting of matter waves*, Phys. Rev. A **68**, 033607 (2003).
- [108] P. F. Bagwell, *Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires*, Phys. Rev. B **41**, 10354 (1990).
- [109] G. Wentzel, *Quantum Theory of Fields* (Interscience, New York, 1949).
- [110] N. Pavloff, *Breakdown of superfluidity of an atom laser past an obstacle*, Phys. Rev. A **66**, 013610 (2002).
- [111] R. Boyd, *Nonlinear Optics* (Academic Press, London, 1992).
- [112] V. J. Goldman, D. C. Tsui und J. E. Cunningham, *Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling structures*, Phys. Rev. Lett. **58**, 1256 (1987).

- [113] C. Presilla, G. Jona-Lasinio und F. Capasso, *Nonlinear feedback oscillations in resonant tunneling through double barriers*, Phys. Rev. B **43**, 5200 (1991).
- [114] M. Y. Azbel', *Quantum turbulence and resonant tunneling*, Phys. Rev. B **59**, 8049 (1999).
- [115] M. A. Cirone, A. Negretti, T. Calarco, P. Krüger und J. Schmiedmayer, *A simple quantum gate with atom chips*, Eur. Phys. J. **35**, 165 (2005).
- [116] P. Devillard und B. Souillard, *Polynomially decaying Transmission for the Nonlinear Schrödinger Equation in Random Media*, J. Stat. Phys. **43**, 423 (1986).
- [117] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul und L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley Interscience, New-York, 1988).
- [118] J. Fortágh, H. Ott, G. Schlotterbeck, C. Zimmermann, B. Herzog und D. Wharam, *Microelectromagnets for trapping and manipulating ultracold atomic quantum gases*, Appl. Phys. Lett. **81**, 1146 (2002).
- [119] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams und D. S. Fisher, *New method for a scaling theory of localization*, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [120] M. V. Berry und S. Klein, *Transparent Mirrors: rays, waves and localization*, Eur. Phys. J. **18**, 222 (1996).
- [121] Wir sprechen hier von Selbstkonsistenz, da das effektive Potential nicht schon a priori bekannt ist, sondern sich erst im Laufe der Zeitevolution entwickelt.
- [122] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C++* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [123] W. A. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equation* (Academic Press, New York, 1977).
- [124] A. Goldberg, H. M. Schey und J. L. Schwartz, American Journal of Physics **35**, (1967).
- [125] E. Cerboneschi, R. Manella, E. Arimondo und L. Salasnich, *Oscillation frequencies for a Bose condensate in a triaxial magnetic trap*, Phys. Lett. A **249**, 495 (1998).
- [126] M. M. Cerimele, M. L. Chiofalo, F. Pistella, S. Succi<sup>1</sup> und M. P. Tosi, *Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation using an explicit finite-difference scheme: An application to trapped Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. E **62**, 1382 (2000).

- [127] M. L. Chiofalo, S. Succi und M. P. Tosi, *Ground state of trapped interacting Bose-Einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm*, Phys. Rev. E **62**, 7438 (2000).
- [128] F. Barth, P. Mühlbauer, F. Nikol und K. Wörle, *Mathematische Formeln und Definitionen* (Bayerischer Schulbuch-Verlag, J. Lindauer Verlag, München, 1994).
- [129] A. R. Mitchell und D. F. Griffiths, *The Finite Difference Methods in Partial Differential Equations* (Wiley, New York, 1980).
- [130] R. D. Richtmyer und K. W. Morton, *Difference Methods for Initial Value Problems* (Wiley-Interscience, New York, 1967).
- [131] G. Golub und C. V. Loan, *Matrix Computations* (John Hopkins University Press, Baltimore, 1983).
- [132] R. P. Tewarson, *Sparse Matrices* (Academic Press, New York, 1973).
- [133] T. Shibata, *Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one-dimensional Schrödinger equation*, Phys. Rev. B **43**, 6760 (1990).
- [134] J. P. Kuska, *Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation on finite intervals*, Phys. Rev. B **46**, 5000 (1992).
- [135] T. Fevens und H. Jiang, SIAM J. Sci. Comput. **21**, 255 (1999).
- [136] B. Engquist und A. Majda, Math. Comput. **31**, 629 (1977).
- [137] T. Paul, K. Richter und P. Schlagheck, *Nonlinear Resonant Transport of Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **94**, 020404 (2005).
- [138] P. Nozières und D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids, Vol. II* (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1990).
- [139] N. Bilas und N. Pavloff, *Propagation of a Dark Soliton in a Disordered Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **95**, 130403 (2005).
- [140] N. Bilas und N. Pavloff, *Dark soliton past a finite-size obstacle*, Phys. Rev. A **72**, 033618 (2005).
- [141] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Pergamon, Oxford, 1958).

# Wissenschaftliche Publikationen und Beiträge

## Publikationen in Journalen

1. *Complex scaling approach to the decay of Bose-Einstein condensates.*

T. Paul und P. Schlagheck

Phys. Rev. A 73, 023619 (2006)

2. *Nonlinear Resonant Transport of Bose-Einstein Condensates.*

T. Paul, K. Richter und P. Schlagheck

Phys. Rev. Lett. 94, 020404 (2005)

3. *Nonlinear Transport of Bose-Einstein Condensates Through Waveguides with Disorder.*

T. Paul, P. Leboeuf, N. Pavloff, K. Richter und P. Schlagheck (2005)

Phys. Rev. A 72, 063621 (2005)

## Beiträge zu Konferenzen

4. *Transport of Bose-Einstein Condensate through Waveguide geometries.*

(Posterpräsentation)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, and Klaus Richter

Atomic Physics 2003.

Workshop, Dezember, 2003, Dresden

5. *Resonant Transport of Bose-Einstein Condensates.* (Posterpräsentation)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, and Klaus Richter

Resonances - From physics to mathematics and back.

Workshop, Januar, 2004, Dresden

6. *Resonant Transport of Bose-Einstein Condensates.* (Vortrag)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, and Klaus Richter

DPG Frühjahrstagung, März, 2004, Regensburg

7. *Transport of Bose Einstein Condensates through Mesoscopic Waveguides.*

(Vortrag)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, and Klaus Richter

DPG Frühjahrstagung, März, 2004, München

8. *Resonant Transport of Bose-Einstein Condensates: Adiabatic control.*

(Posterpräsentation)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, and Klaus Richter

Mesoscopic phenomena in ultracold matter: From single atoms to coherent ensembles.

Workshop, Oktober, 2004, Dresden

9. *Transport of Bose-Einstein Condensates through disorderd Potentials.*

(Vortrag)

Tobias Paul, Peter Schlagheck, Patricio Leboeuf, and Nicolas Pavloff

DPG Frühjahrstagung, März, 2005, Berlin

# Danksagung

An dieser Stelle ist es mir eine große Freude, all denjenigen zu danken, die mit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

An erster Stelle möchte ich hier meinem Doktorvater Professor Dr. Klaus Richter danken, der mir ein freies und doch zielgerichtetes Arbeiten möglich machte. Ohne seine ausgezeichnete Betreuung und die ständige Bereitschaft zu fachlicher Diskussion, würde diese Arbeit sicher nicht in dieser Form vorliegen.

Einen nicht minder wichtigen Beitrag hat mein Betreuer Dr. Peter Schlagheck am Gelingen dieser Arbeit. Seine exzellente Betreuung und Anleitung zum wissenschaftlichen Arbeiten hat das Gelingen dieser Arbeit überhaupt erst möglich gemacht. Seine ständige Bereitschaft zu inspirierender und kritischer Diskussion war mir während meiner Forschungstätigkeit eine unersetzliche Hilfe.

Ein weiterer Dank geht hier an Professor Dr. Peter Schmelcher, der sich mit seiner ausgezeichneten Expertise auf dem Gebiet der Physik kalter Atome bei der Formulierung und Zielsetzung dieser Arbeit verdient gemacht hat. Sein Weitblick bei der Auswahl des Themas hat dazu beigetragen, mir ein spannendes Arbeitsgebiet von großer Aktualität zu erschließen.

Des Weiteren will ich mich hier bei meinen Kollaborationspartnern Dr. Nicolas Pavloff und Dr. Patricio Leboeuf in Orsay bedanken, die durch ihre Vorarbeiten, viel Einsatz und ihre ständigen Bereitschaft zu Diskussionen, einen großen Anteil, besonders was den Transport durch Unordnungsregionen angeht, am Gelingen dieser Arbeit haben.

In diesem Zusammenhang sei auch dem Bayerisch-Französischen Hochschulzentrum für die finanzielle Unterstützung meines mehrmonatigen wissenschaftlichen Aufenthalts in Orsay gedankt.

Für wertvolle Anregungen und inspirierende Diskussionen bin ich auch Dr. József Forthág, Dr. Joachim Brand, Dirk Witthaut und Markus Popp sehr dankbar.

Für das kritische Lesen des Manuskripts und wertvolle Verbesserungsvorschläge gilt mein herzlicher Dank Dr. Peter Schlagheck und Michael Hartung.

Allen jetzigen und ehemaligen Lehrstuhlmitgliedern sei ebenfalls für das angenehme Klima, das ich am Lehrstuhl erfahren durfte, gedankt. Besonders gilt mein Dank meinem Bürokollegen Andreas Laßl, und dem am Lehrstuhl häufig und gern gesehenen Gast Professor Dr. Juan Diego Urbina, vor allem für ihre Aufmunterungen während des Zusammenschreibens. Auch den weiteren Mitgliedern der *Sub-Sub AG Bose-Einstein-Kondensation*, Thomas Ernst und Michael Hartung, sei hier Dank ausgesprochen. An dieser Stelle sei Angela Reisser besonders hervorgehoben, die nicht nur mit der täglichen Kaffee- und Tee-Runde, sondern auch durch ihre ständige Hilfsbereitschaft für ein Stück Lebensqualität am Lehrstuhl sorgt.

Dank gebührt auch allen EDV Systemadministratoren, die durch ihren unermüdlichen Einsatz für eine funktionierende EDV Infrastruktur am Lehrstuhl und in der Fakultät sorgen.

Ein besonders lieber Dank sei hier auch an Simone Kagerbauer gerichtet, die mir immer ihre liebevolle, moralische Unterstützung zuteil werden ließ.

Abschließend soll hier der Freistaat Bayern nicht vergessen werden, dessen finanzielles Engagement meine Forschungsarbeiten überhaupt erst ermöglicht hat und mir mehrere Jahre ein anregendes Arbeitsfeld in Forschung und Lehre an der Universität Regensburg beschert hat. Es bleibt zu wünschen, dass auch zukünftigen Generationen dieses Privileg zuteil werden kann.

Regensburg, im Januar 2006.